

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra mechaniky

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Implementace lattice Boltzmannovy metody pro
simulaci proudění nestlačitelných vazkých kapalin

Plzeň 2018

Aleš Halama

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci na téma Implementace lattice Boltzmannovy metody pro simulaci proudění nestlačitelných vazkých kapalin vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V Plzni dne 5. května 2018

.....
podpis

Rád bych poděkoval doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D. za cenné rady, věcné připomínky a vstřícnost při konzultacích bakalářské práce. Děkuji také Ing. Ondřeji Bublíkovi, Ph.D. za pomoc při implementaci metody ve vývojovém prostředí MATLAB. V poslední řadě děkuji rodině za poskytnuté zázemí a psychickou podporu, bez které by tato práce nevznikla.

Abstrakt

Cílem této bakalářské práce je proniknout do problematiky modelování proudění nestlačitelných vazkých kapalin pomocí lattice Boltzmannovy metody a osvojit si její základní principy. V této práci je popsán způsob algoritmizace metody s ohledem na řešený fyzikální problém, způsob implementace okrajových podmínek a nalezení potřebných relaxačních parametrů. Následně je vyvinutý algoritmus metody použit pro numerické řešení testovacích úloh ve 2D, jako je proudění nestlačitelné vazké kapaliny v kavitě a horizontálním kanálu.

klíčová slova: nestlačitelná vazká kapalina, lattice Boltzmannova metoda, proudění v horizontálním kanálu, proudění v kavitě, numerické simulace.

Abstract

The aim of this bachelor thesis is to understand the issue of a flow of an incompressible viscous fluid using the lattice Boltzmann method and to acquire its basic principles. This work describes the algorithmization of the lattice Boltzmann method with taking to account the examined physical problem, the implementation of its boundary conditions and finding of necessary relaxation parameters. Then, the developed algorithm is used for numerical solutions of 2D test problems such as incompressible viscous fluid flow in a 2D cavity and a 2D channel.

key words: incompressible viscous fluid, lattice Boltzmann method, flow in horizontal channel, flow in cavity, numerical simulations.

Obsah

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Úvod | 1 |
| 2 | Princip lattice Boltzmannovy metody | 3 |
| 2.1 | Boltzmannova rovnice | 3 |
| 2.2 | Lattice Boltzmannova metoda | 6 |
| 2.3 | Kolizní a propagační fáze | 8 |
| 2.3.1 | Kolize | 8 |
| 2.3.2 | Propagace | 10 |
| 2.4 | Okrajové podmínky | 11 |
| 2.4.1 | Okrajové podmínky pro proudění v kanálu | 11 |
| 2.4.2 | Okrajové podmínky pro proudění v kavitě | 20 |
| 2.5 | Podobnostní modelování | 26 |
| 3 | Implementace lattice Boltzmannovy metody a numerické výsledky | 28 |
| 3.1 | Algoritmus | 28 |
| 3.2 | Proudění nestlačitelné vazké tekutiny ve 2D kavitě | 30 |
| 3.3 | Ustálené proudění nestlačitelné vazké tekutiny ve 2D kanálu | 35 |
| 4 | Závěr | 37 |

1 Úvod

S rostoucí mírou industrializace se výpočtová dynamika tekutin stala jednou z klíčových odvětví mechaniky. V současnosti výpočtové metody dynamiky tekutin nacházejí široké využití v leteckém průmyslu, medicíně, meteorologii, hydrodynamickém průmyslu a ve spoustě dalších odvětví průmyslu. Od šedesátých let dvacátého století bylo vynaloženo mnoho úsilí v oblasti výzkumu modelování tekutin se zvyšující se popularizací aeronautiky a kosmonautiky. Vznikly první metody, ze kterých ovšem většina přestávala být spolehlivá z důvodu vyšších nároků a počátku éry výkonných počítačů.

Z klasických numerických metod, které se hojně využívají dodnes pro řešení problémů proudění tekutin, lze zmínit metodu konečných prvků (FEM), nebo metodu konečných objemů (FVM). Jedná se o základní diskretizační metody nelineárního systému Navierových - Stokesových rovnic popisujících proudění vazkých tekutin. V případě laminárního proudění nestlačitelné, vazké newtonské kapaliny se nelineární systém Navierových - Stokesových rovnic vyjádří ve tvaru [1]

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \cdot \mathbf{v}, \quad (1.0.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.0.2)$$

kde \mathbf{v} je vektor rychlosti kapaliny, ρ je hustota, p je statický tlak a ν je kinematická viskozita kapaliny.

Paralelně s klasickými numerickými metodami, jež se používají pro modelování tekutiny chápané jako kontinuum (FEM, FVM) se také vyvinuly metody založené na modelování dynamiky jednotlivých částic tekutiny. Ty narozdíl od metod založených na diskretizaci kontinua, nepočítají s makroskopickými veličinami vystupujícími v systému Navierových - Stokesových rovnic, ale cílí na jednotlivé částice tekutiny. Takovou metodou je například lattice Boltzmannova metoda (LBM), které je věnována tato práce. Výhodou lattice Boltzmannovy metody je zejména její snadnější způsob implementace v porovnání s klasickými numerickými metodami. Protože lattice Boltzmannova metoda pracuje s pravděpodobností pohybu dostatečně velkého shluku částic, je jakýmsi kompromisem mezi mikroskopickým a makroskopickým přístupem. Lze ji tedy za určitých předpokladů aplikovat jak pro řešení úloh v mikroměřítku, tak v makroměřítku. Namísto numerického řešení nelineárních parciálních diferenciálních rovnic je její princip charakterizován pohybem shluků v omezených směrech konstantní rychlostí a pouze po vytvořené ekvidistantní mřížce. Zákony zachování hmoty, hybnosti a celkové energie jsou zajištěny vzájemnými interakcemi v uzlech mřížky prostřednictvím kolizí distribučních (pravděpodobnostních) funkcí. Jedna z hlavních výhod metody je implementace okrajových podmínek na pevné nepropustné stěně. Touto metodou lze také numericky simulovat proudění tekutiny v porézním materiálu [14], turbulentní proudění [15] nebo proudění, ve kterém se uvažuje vliv objemových sil [16]. Lattice Boltzmannovu metodu

lze dobře paralelizovat a tím zlepšit časovou složitost výpočtu [3], [15]. Je až překvapivé, že pomocí této metody lze získat numerické hodnoty, které jsou v dobré shodě s reálnými hodnotami. Tato metoda má však i svoje nevýhody. Mezi hlavní nevýhody metody patří nestabilita pro vysoká Reynoldsova čísla [8], implementace okrajových podmínek na zakřivené stěně nebo vyšší náročnost na výpočetní paměť.

Cíl a struktura práce

Cílem této bakalářské práce je seznámit se se základními principy lattice Boltzmannovy metody pro modelování proudění nestlačitelných vazkých kapalin a implementovat vlastní navržený algoritmus metody ve výpočtovém prostředí MATLAB. Následně pak vyvinutý software založený na lattice Boltzmannově metodě použít pro numerické řešení dvou zvolených testovacích úloh ve 2D.

V první části této práce jsou obecně popsány základní principy lattice Boltzmannovy metody, je vysvětlena fáze kolize a propagace a je popsána implementace okrajových podmínek a rekonstrukce makroskopických veličin. Ve druhé části této práce je provedena numerická simulace proudění nestlačitelné vazké newtonské kapaliny ve 2D kavitě a v horizontálním 2D kanálu pomocí vlastního vyvinutého softwaru založeného na lattice Boltzmannově metodě. Dosažené numerické výsledky jsou v případě proudění kapaliny v kavitě porovnány s numerickými výsledky publikovanými v literatuře [3] a v případě proudění v horizontálním 2D kanálu jsou porovnány s analytickým řešením.

seznam zkratk

CFD - Computational fluid dynamics

FEM - Finite element method

FVM - Finite volume method

LBM - Lattice Boltzmann method

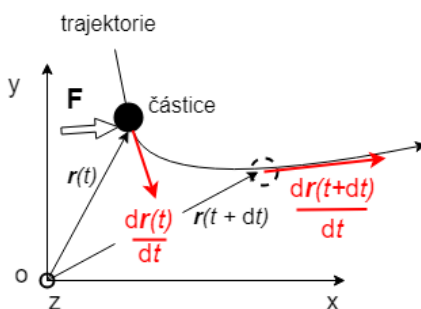
SRT - Single relaxation time

MRT - Multiple relaxation time

2 Princip lattice Boltzmannovy metody

2.1 Boltzmannova rovnice

Tekutiny jsou tvořeny atomy nebo molekulami. Tyto mikroskopické částice si lze představit jako hmotné body, které se náhodně pohybují prostorem. Jejich pohyb vychází ze základních zákonů zachování hmotnosti, hybnosti a energie. Jednotlivé částice při pohybu rovněž interagují s okolními částicemi. Při srážce částice s jinou částicí se účinkem vnější síly \mathbf{F} sledovaná částice vychýlí ze své trajektorie. Pohyb jedné částice lze definovat jejím polohovým vektorem $\mathbf{r}(t)$ v souřadnicovém systému $Oxyz$, jeho první derivací podle času čili rychlostí $\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt}$ a jeho druhou derivací podle času čili zrychlením $\frac{d^2\mathbf{r}(t)}{dt^2}$, viz obr. 1.



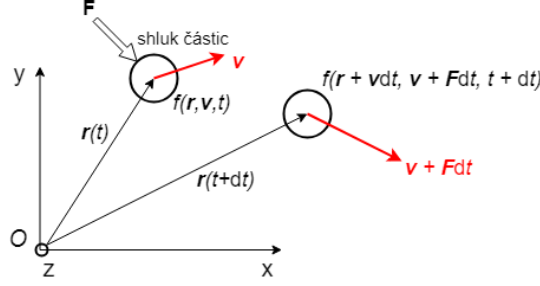
Obr. 1: Pohyb částice v souřadnicovém systému $Oxyz$

Ačkoli se zdá tento popis jednoduchý, je v praktických případech řešení proudění tekutin vzhledem k velikému počtu částic obtížně realizovatelný. Východiskem může být popis tekutiny na jakési střední úrovni tzv. mezoškály. Zde jsou tekutiny reprezentovány pomocí distribučních funkcí $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ vyjadřujících pravděpodobnost výskytu shluku částic v dané pozici \mathbf{r} o rychlosti \mathbf{v} a v čase t [2].

Představme si shluk částic, jejichž počet je vyjádřen distribuční funkcí $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ v místě \mathbf{r} o rychlosti \mathbf{v} v čase t . Působí-li na tento shluk částic nějaká vnější síla \mathbf{F} vztažená na jednotku hmotnosti, změní se tím její rychlost z \mathbf{v} na $\mathbf{v} + \mathbf{F}dt$, tudíž i pozice z \mathbf{r} na $\mathbf{r} + \mathbf{v}dt$, viz obr. 2. V ideálním prostředí se během srážky ze shluku žádná částice neodštěpí nebo naopak nepřibude. Shluk po srážce je stejný, jako ten samý shluk před srážkou. Tudíž pro odvození Boltzmannovy rovnice podle [3] platí

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \mathbf{F}dt, t + dt)d\mathbf{r}d\mathbf{v} - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{v} = 0. \quad (2.1.1)$$

Avšak v případě, který se blíží realitě není srážka dvou shluků ideální, tudíž dochází k odštěpení nebo nárůstu počtu částic.



Obr. 2: Pohyb shluku částic v souřadnicovém systému $Oxyz$

Takovouto změnu definuje kolizní operátor $\Omega(f)$. Rovnice (2.1.1) se tedy změní na

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \mathbf{F}dt, t + dt)d\mathbf{r}d\mathbf{v} - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{v} = \Omega(f)d\mathbf{r}d\mathbf{v}dt. \quad (2.1.2)$$

Úpravou rovnice (2.1.2) získáme

$$\frac{f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \mathbf{F}dt, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \Omega(f). \quad (2.1.3)$$

Výraz na levé straně rovnosti (2.1.3) je vlastně elementární změna distribuční funkce v čase (dále psáno bez závislých proměnných), a proto ji můžeme přepsat do tvaru

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f). \quad (2.1.4)$$

Mějme na mysli, že funkce f je stále funkcí polohy, rychlosti a času. Ze znalosti derivace složené funkce podle času víme, že výraz na levé straně rovnice (2.1.4) lze vyjádřit jako

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (2.1.5)$$

Ze zlatých rovnic kinematiky víme, že $\frac{d\mathbf{r}}{dt}$ se rovná rychlosti \mathbf{v} a $\frac{d\mathbf{v}}{dt}$ se rovná zrychlení \mathbf{a} . Pak lze derivaci složené funkce (2.1.5) ještě upravit na

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{a} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (2.1.6)$$

Výraz (2.1.6) zjednodušíme uplatněním druhého Newtonova pohybového zákona $\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m}$, kde \mathbf{F} je například objemová síla a m je hmotnost. Právě tuto sílu \mathbf{F} uvažujeme nulovou. Takto upravený výraz dosadíme zpět do rovnice (2.1.4). Získáme tak spojitou Boltzmannovu rovnici popisující pouze přenos tekutiny bez vlivu vnějších sil ve spojitém kontinuu. Boltzmannova transportní rovnice se nejčastěji zapisuje pomocí operátoru $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ a má tvar

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f = \Omega(f). \quad (2.1.7)$$

Boltzmannova rovnice je parciální diferenciální rovnice se zdrojovým členem, kterou je třeba řešit numericky. K obtížnosti přispívá největší mírou fakt, že operátor Ω je funkcí f . Spojitá Boltzmannova rovnice vyhovuje konzervativním zákonům. Vztahy mezi distribučními funkcemi a makroskopickými veličinami charakterizující proudové pole jsou následující

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int m f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (2.1.8)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int m \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (2.1.9)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int m \mathbf{u}_a^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (2.1.10)$$

kde m je molární hmotnost, ρ je hustota, e je vnitřní energie a \mathbf{u}_a je relativní rychlost částice vůči rychlosti tekutiny \mathbf{u} . Tyto rovnice vyjadřují zákon zachování hmotnosti (2.1.8), hybnosti (2.1.9) a celkové energie (2.1.10). Boltzmannovu rovnici (2.1.7) je potřeba řešit numericky. Obdobně jako u FEM a FVM se proto využívá diskrétní formulace. Levá strana rovnice (2.1.7) reprezentuje přenos tekutiny v prostoru. Provedeme dále diskretizaci Boltzmannovy rovnice do zvolených směrů označených indexy i , jež budou dále podrobně popsány v odstavci 2.2. Diskrétní tvar Boltzmannovy rovnice je potom

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \nabla f_i = \Omega(f). \quad (2.1.11)$$

Pravá strana rovnice (2.1.11) reprezentuje proces kolize. Protože je operátor Ω závislý na f , je třeba jej také diskretizovat. S nejvíce používanou diskrétní formulací operátoru Ω , přišli pánové Bhatnagar, Gross a Krook [3], kdy operátor Ω aproximovali výrazem

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f), \quad (2.1.12)$$

kde $\omega = \frac{1}{\tau}$ je kolizní frekvence, f distribuční funkce, kterou si je možno představit jako odchylku od rovnovážné distribuční funkce f^{eq} a τ je relaxační čas, který charakterizuje přechod distribuční funkce f do rovnovážné distribuční funkce f^{eq} . Existuje vztah mezi kinematickou vizkozitou a relaxačním parametrem τ , který má z Navierových - Stokesových rovnic tvar [7]

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} c^2 dt, \quad (2.1.13)$$

kde význam c a dt je popsán v následujícím odstavci. Takové aproximaci se v terminologii lattice Boltzmannovy metody říká SRT - single relaxation time. Podrobnosti

a alternativní možnosti aproximace Ω jsou popsány v dalších odstavcích. Dosazením výrazu (2.1.12) do rovnice (2.1.11) získáme diskrétní tvar Boltzmannovy rovnice

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i). \quad (2.1.14)$$

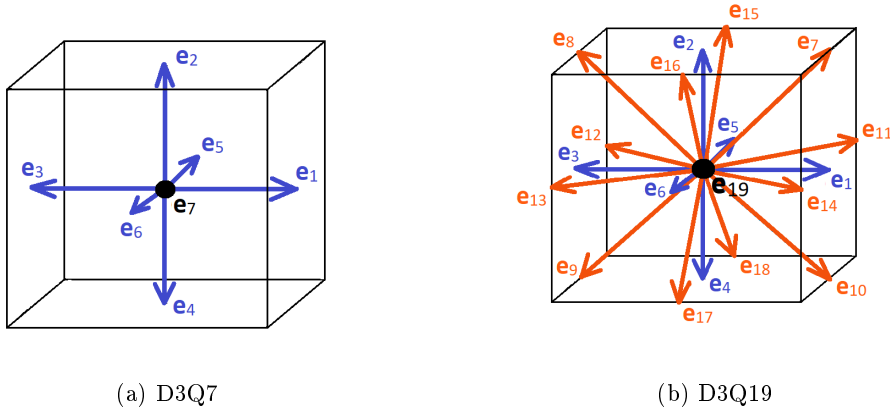
Tato rovnice je páteří lattice Boltzmannovy metody.

2.2 Lattice Boltzmannova metoda

Předpis pro lattice Boltzmannovu metodu se získá z rovnice (2.1.14) časovou diskretizací parciální derivace f_i a rozšířením v Taylorovu řadu obdobně jako v [4]. Boltzmannova rovnice nabývá pro lattice Boltzmannovu metodu tvaru [5]

$$\underbrace{f_i(\mathbf{r} + \tilde{c}\mathbf{e}_i d\tilde{t}, t + d\tilde{t})}_{\text{propagace}} = \underbrace{f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{d\tilde{t}}{\tau} (f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t))}_{\text{kolize}}, \quad (2.2.1)$$

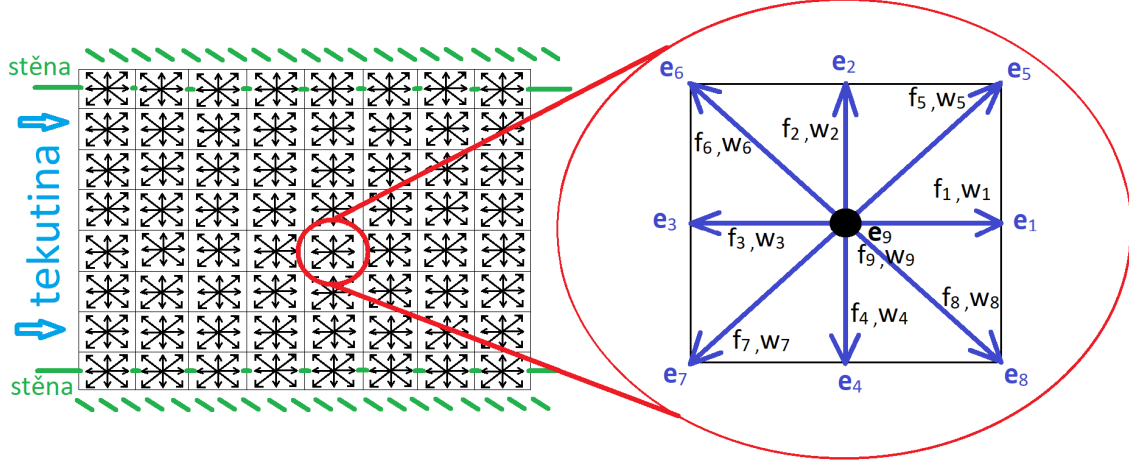
kde $f_i(\mathbf{r} + \tilde{c}\mathbf{e}_i d\tilde{t}, t + d\tilde{t})$ je distribuční funkce posunutá o $d\tilde{t}$ mřížkový časový krok vpřed, $f_i(\mathbf{r}, t)$ je distribuční funkce v aktuálním časovém kroku, $f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)$ je rovnovážná distribuční funkce v aktuálním časovém kroku, \tilde{c} je mřížková rychlost a τ je relaxační čas. Poznamenejme na tomto místě, že parametry označené \sim jsou parametry v lattice Boltzmannovo jednotkách, nikoli ve fyzikálních jednotkách, viz odstavec 2.5. Důležitou roli reprezentují směrové vektory \mathbf{e}_i , které charakterizují počet a směry, ve kterých se distribuční funkce mohou po výpočtové mřížce pohybovat k sousedním uzlům. Pro prostorový problém se například využívá rychlostního modelu $D3Q7$, viz obr.3(a) nebo složitějšího $D3Q19$ modelu, viz obr. 3(b). Číslo za D značí jestli se jedná o rovinný nebo prostorový model a číslo za Q počet směrů.



Obr.3 : Rychlostní modely ve 3D

Tato práce je věnována řešení rovinných problémů, a proto budou podrobněji popsány $D2$ rychlostní modely. Mezi nejjednodušší rovinné problémy se řadí proudění

tekutiny mezi dvěma deskami, na níž se lattice Boltzmannova metoda pro pochopení snadno demonstruje. Vlevo na obr. 4 je mřížka, která diskretizuje výpočtovou oblast. V každé buňce mřížky je uzel, jehož detail je znázorněn v pravé části obr. 4. Tento rychlostní model se označuje D2Q9 a pro rovinné problémy je hojně využíván.



Obr. 4 : D2Q9

V případě modelu $D2Q9$ nabývají směrové vektory hodnot [6]

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_i &= (0, 0), & \text{pro } i = 9, \\ \mathbf{e}_i &= \tilde{c}(\cos((i-1)\frac{\pi}{4}), \sin((i-1)\frac{\pi}{4})), & \text{pro } i = 1, 2, 3, 4, \\ \mathbf{e}_i &= \sqrt{2}\tilde{c}(\cos((i-1)\frac{\pi}{4}), \sin((i-1)\frac{\pi}{4})), & \text{pro } i = 5, 6, 7, 8, \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

kde $\tilde{c} = d\tilde{x}/d\tilde{t}$ je mřížková rychlost, $d\tilde{x}$ značí konstantní mřížkovou vzdálenost a $d\tilde{t}$ konstantní mřížkový časový krok. Lze si povšimnout, že f_9 náležící vektoru \mathbf{e}_9 vždy setrvává ve středu uzlu. Každá distribuční funkce přispívá k celkové hustotě v uzlu svoji určitou vahou, viz obr. 4. Součet těchto vah musí být roven celku, čili jedné. Jednotka v tomto případě znamená 100% měrné hmoty (hustoty). Hodnota vah je následující [5]

$$w_i = \begin{cases} \frac{4}{9}, & \text{pro } i = 9, \\ \frac{1}{9}, & \text{pro } i = 1, 2, 3, 4, \\ \frac{1}{36}, & \text{pro } i = 5, 6, 7, 8. \end{cases} \quad (2.2.3)$$

Pro rovnovážné distribuční funkce figurující v rovnici (2.2.1) pro model D2Q9 platí vztah [4]

$$f_i^{eq} = w_i \tilde{\rho} \left[1 + \frac{3\mathbf{e}_i \tilde{\mathbf{v}}}{\tilde{c}^2} + \frac{9(\mathbf{e}_i \tilde{\mathbf{v}})^2}{2\tilde{c}^4} - \frac{3\tilde{\mathbf{v}}^2}{2\tilde{c}^2} \right], \text{ pro } i = 1, 2, 3, \dots, 9, \quad (2.2.4)$$

kde $\tilde{\rho}$ je hustota v uzlu a $\tilde{\mathbf{v}}$ je vektor rychlosti tekutiny.

2.3 Kolizní a propagační fáze

Algoritmus lattice Boltzmannovy metody probíhá v cyklech. V každém cyklu se uskutečňují dvě fáze a to propagace a kolize. Na jejich pořadí nezáleží, ale v této práci se provede nejprve kolizní fáze a poté propagační fáze.

2.3.1 Kolize

Během kolizní fáze, dochází ve všech uzlech výpočtové mříže k pomyslné srážce distribučních funkcí. Pomocí modelu SRT - single relaxation time realizujeme kolizní fázi užitím vhodného relaxačního času τ , který musí být větší než $\frac{1}{2}$ k zajištění numerické stability. Platnost vztahu (2.3.1) vyjadřuje vztah mezi kinematickou vizkozitou $\tilde{\nu}$ a relaxačním časem

$$\tilde{\nu} = \frac{2\tau - 1}{6} c^2 \tilde{dt}. \quad (2.3.1)$$

Jestliže se τ blíží limitně k $\frac{1}{2}$, pak se kinematická vizkozita podle tohoto vztahu blíží nule. Pro bezrozměrné Reynoldsovo číslo platí

$$\tilde{R}_e = \frac{\tilde{u}_{avg} \tilde{H}}{\tilde{\nu}}, \quad (2.3.2)$$

kde \tilde{u}_{avg} je charakteristická rychlost a \tilde{H} je charakteristický rozměr. Pokud se z předchozího blíží kinematická vizkozita nule, pak se Reynoldsovo číslo blíží nekonečnu a výpočet ztrácí fyzikální smysl a stabilitu. Z toho plyne důsledek, že lattice Boltzmannova metoda v kombinaci s SRT modelem je stabilní pouze pro $\tau > \frac{1}{2}$.

Relaxační čas také nepříznivě ovlivňuje výpočet hustoty $\tilde{\rho}$. Čím větší je hodnota τ , tím je kapalina stlačitelnější a to je u modelování nestlačitelné kapaliny nepřijatelné. Při implementaci je tedy nutné najít takovou hodnotu τ , která není příliš velká a zároveň se neblíží $\frac{1}{2}$. Kolize řízená SRT modelem je

$$f_i^{kolize}(\mathbf{r}, t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{\tilde{dt}}{\tau} (f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)), \quad i = 1, 2, 3, \dots, 9, \quad (2.3.3)$$

kde dochází k výpočtu kolizních funkcí f_i^{kolize} pomocí distribučních funkcí f_i , které se do uzlu přesunuly ze sousedních uzlů a pomocí rovnovážných distribučních funkcí f_i^{eq} , které je nutné před každou kolizí přepočítat. Ve fázi inicializace algoritmu se před kolizí žádné distribuční funkce nepřesouvají a tekutina je v klidu tzn.

$$f_i(\mathbf{r}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, 2, 3, \dots, 9. \quad (2.3.4)$$

Dosazením této rovnosti, se rovnice (2.3.3) změní na

$$f_i^{kolize}(\mathbf{r}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, 2, 3, \dots, 9. \quad (2.3.5)$$

Po fázi inicializace to ale už neplatí, distribuční funkce se přesouvají a kolize se řídí standardně vztahem (2.3.3). Alternativou k SRT modelu je model MRT - multiple

relaxation time. Tato modifikace lattice Boltzmannovy metody byla vyvinuta proto, aby vyřešila nedostatek SRT modelu týkající se nestability algoritmu, když se τ blíží k $\frac{1}{2}$. Myšlenkou MRT modelu je provést kolizi v momentovém prostoru namísto v prostoru distribučních funkcí a pro každý moment použít jiný relaxační čas, který je pro daný moment nejvhodnější. Poznamenejme, že u SRT modelu se používá jeden relaxační čas pro všechny distribuční funkce.

Pro převod distribučních funkcí \mathbf{f} do svého momentového prostoru \mathbf{m} se využívá transformace pomocí transformační matice. Převod pro model $D2Q9$ je následující [8]

$$\mathbf{f} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}, \quad (2.3.6)$$

kde $\mathbf{m} = (e, \epsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{yy}, \rho)^T$ je vektor momentů, $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_8, f_9)^T$ je vektor distribučních funkcí a \mathbf{M} je transformační matice, která je v neinverzním a inverzním tvaru pro model $D2Q9$ tvořena

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 & -4 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}^{-1} = \frac{1}{36} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 & 6 & -6 & 0 & 0 & 9 & 0 \\ 4 & -1 & -2 & 0 & 0 & 6 & -6 & -9 & 0 \\ 4 & -1 & -2 & -6 & 6 & 0 & 0 & 9 & 0 \\ 4 & -1 & -2 & 0 & 0 & -6 & 6 & -9 & 0 \\ 4 & 2 & 1 & 6 & 3 & 6 & 3 & 0 & 9 \\ 4 & 2 & 1 & -6 & -3 & 6 & 3 & 0 & -9 \\ 4 & 2 & 1 & -6 & -3 & -6 & -3 & 0 & 9 \\ 4 & 2 & 1 & 6 & 3 & -6 & -3 & 0 & -9 \\ 4 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.3.7)$$

Rovnost (2.3.6) platí i pro rovnovážné distribuční funkce, které je také nutné přetransformovat. Místo jednoho relaxačního času, jako v případě SRT modelu, se zavádí diagonální matice $\mathbf{S} = \text{diag}(S_e, S_\epsilon, S_{j_x}, S_{q_x}, S_{j_y}, S_{q_y}, S_{p_{xx}}, S_{p_{yy}}, S_\rho)$ s více relaxačními časy odpovídajícími vektoru momentů \mathbf{m} . Obdobně jako u SRT modelu i tyto relaxační časy se volí, ale protože se volí pro každý moment co nejvhodněji, docílí se tím mnohem větší stability než u SRT modelu. Relaxační časy S_{j_x}, S_{j_y}, S_ρ jsou časy pro komponenty hybnosti tekutiny a jejich hodnota se volí stejná. Relaxační časy $S_{p_{xx}}$ a $S_{p_{yy}}$ se volí jako u SRT modelu rovny $\frac{\tilde{dt}}{\tau}$. Zbylé relaxační časy jsou pro hydrodynamické komponenty tekutiny, jejichž hodnota se většinou volí větší než jedna. Kombinace těchto relaxačních časů ovlivní například přesnost okrajových podmínek nebo stlačitelnost tekutiny.

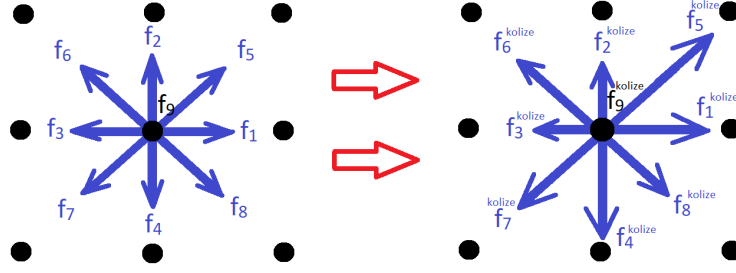
Řídicí rovnice MRT modelu má v prostoru momentů tvar

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}^{kolize}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t)). \quad (2.3.8)$$

Tato rovnice vyjadřuje kolizi v momentovém prostoru, kterou je nutné převést zpět do prostoru distribučních funkcí. Ze znalosti platnosti (2.3.6) víme, že $\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{f}$. Dosadíme-li tento vztah do rovnice (2.3.8), získáme tím vztah pro převod do momentového prostoru a zároveň zpět do prostoru distribučních funkcí v podobě

$$\mathbf{f}^{kolize}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{M}(\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)). \quad (2.3.9)$$

Inicializace algoritmu probíhá stejně jako SRT modelu, viz rovnice (2.3.4) a (2.3.5). Pro lepší představu je proces kolize znázorněn na obr. 5.



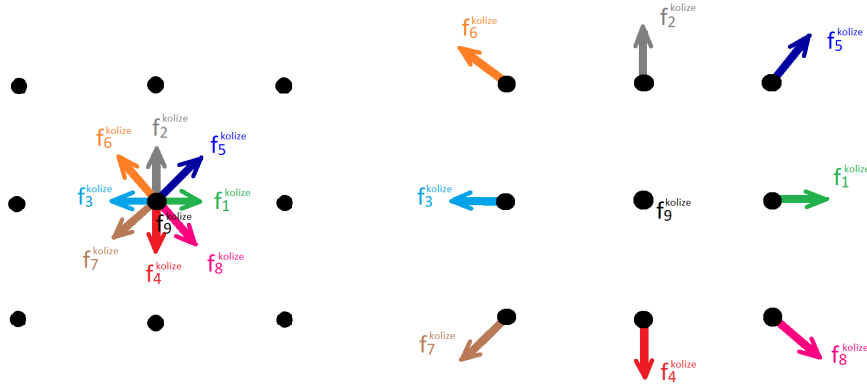
Obr. 5 : Kolizní fáze

2.3.2 Propagace

Při propagační fázi dochází k přesunu distribučních funkcí ve smyslu směrových vektorů do sousedních uzlů. Proces je řízen vztahem

$$f_i(\mathbf{r} + \tilde{c}\mathbf{e}_i d\tilde{t}, t + d\tilde{t}) = f_i^{kolize}(\mathbf{r}, t) \text{ pro } i = 1, 2, 3, \dots, 9. \quad (2.3.10)$$

Propagace pro rychlostní model $D2Q9$ je zobrazena na obr. 6.



Obr. 6 : Propagační fáze

Po propagaci je možné určit makroskopické veličiny pro jednotlivé uzly výpočtové mříže. Pro jejich výpočet platí

$$\tilde{\rho} = \sum_{i=1}^9 f_i(\mathbf{r} + \tilde{c}\mathbf{e}_i d\tilde{t}, t + d\tilde{t}), \quad (2.3.11)$$

kde $\tilde{\rho}$ je makroskopická hustota tekutiny v uzlech výpočtové mříže. Dále

$$\tilde{v} = \sum_{i=1}^9 \frac{\tilde{c}f_i(\mathbf{r} + \tilde{c}\mathbf{e}_i d\tilde{t}, t + d\tilde{t})\mathbf{e}_i}{\tilde{\rho}}, \quad (2.3.12)$$

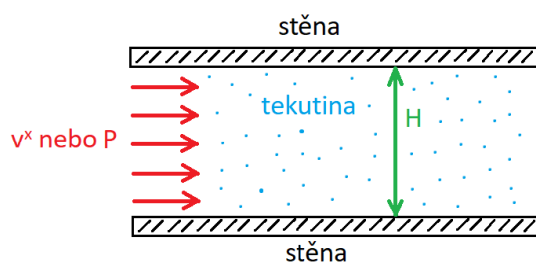
kde \tilde{v} je makroskopická rychlost tekutiny v uzlech výpočtové mříže. Problém nastává v krajních uzlech, ve kterých nejsou známy všechny distribuční funkce. Tyto problémy ošetřují okrajové podmínky, jež jsou detailně popsány v následujícím odstavci.

2.4 Okrajové podmínky

Účelem numerických simulací je predikovat chování požadované tekutiny [9]. Při numerických simulacích se obvykle vyskytují problémy na hranici výpočtové oblasti. U lattice Boltzmannovy metody jsou to místa, jako například vstup nebo výstup z výpočtové oblasti, interakce tekutiny se stěnou a jiné. Nejjednodušším způsobem by bylo spočítat makroskopické veličiny pomocí distribučních funkcí v uzlech mřížky, které se nacházejí na hranici výpočtové oblasti. Avšak vlivem propagace nejsou v těchto uzlech všechny distribuční funkce známy, a proto nemohou být použity vztahy (2.3.11) a (2.3.12). Principem okrajových podmínek v případě lattice Boltzmannovy metody je vypočítat chybějící distribuční funkce. Správnost vyjádření a implementace okrajových podmínek má dopad na přesnost a stabilitu celého algoritmu. Výzkum okrajových podmínek však není úplně uzavřen a stále dochází k postupnému zdokonalování i za cenu větší komplexnosti. V následujících pododstavcích jsou přiblíženy okrajové podmínky, které se vyskytují v nejjednodušších rovinných problémech jako je proudění nestlačitelné vazké kapaliny ve 2D kanálu, nebo ve 2D kavitě. Okrajové podmínky lze klasifikovat na podmínky pro pevnou nepropustnou stěnu a podmínky pro vstup a výstup výpočtové oblasti, jako je tomu v následujících pododstavcích.

2.4.1 Okrajové podmínky pro proudění v kanálu

Pro představu definujme problém. Uvažujme dvě rovnoběžné desky vzdálené od sebe o charakteristický rozměr H a mezi nimi proudící tekutinu.

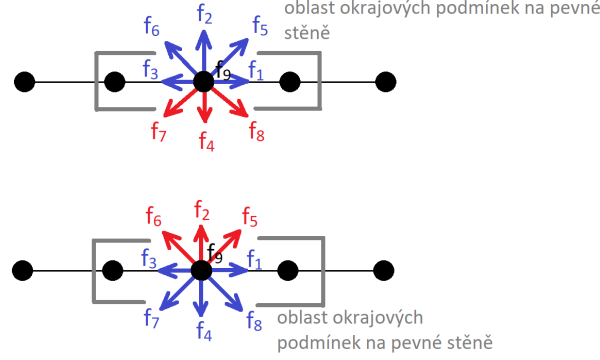


Obr. 7 : Schéma uvažované výpočtové oblasti

U každého takového problému musí být známy některé veličiny jako například rychlost, tlak ale i charakteristický rozměr.

Okrajové podmínky na pevné nepropustné stěně

Tyto okrajové podmínky zajišťují interakci tekutiny s pevným rovným nepropustným povrchem. Jejich princip tkví v odrazení přichozích distribučních funkcí do opačného směru, odkud přitekly. Tímto se dodefinují neznámé distribuční funkce, které jsou znázorněny červeně na obr. 8.



Obr. 8 : Schéma realizace okrajových podmínek na pevné stěně

Tomuto způsobu implementace okrajových podmínek se říká z anglického jazyka bounceback. Jeho matematická formulace například pro distribuční funkci f_8 , spočívá v rovnosti

$$f_8 - f_8^{eq} = f_6 - f_6^{eq}, \quad (2.4.1)$$

kde rovnovážné distribuční funkce lze rozepsat podle rovnice (2.2.4). Jestliže tak provedeme, okrajová podmínka typu bounceback se pozmění na

$$f_8 - \frac{1}{36} \tilde{\rho} \left(1 + \frac{3(e_8 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9(e_8 \tilde{\mathbf{v}})^2}{2\tilde{c}^4} - \frac{3\tilde{\mathbf{v}}^2}{2\tilde{c}^2} \right) = f_6 - \frac{1}{36} \tilde{\rho} \left(1 + 3\frac{(e_6 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9(e_6 \tilde{\mathbf{v}})^2}{2\tilde{c}^4} - \frac{3\tilde{\mathbf{v}}^2}{2\tilde{c}^2} \right). \quad (2.4.2)$$

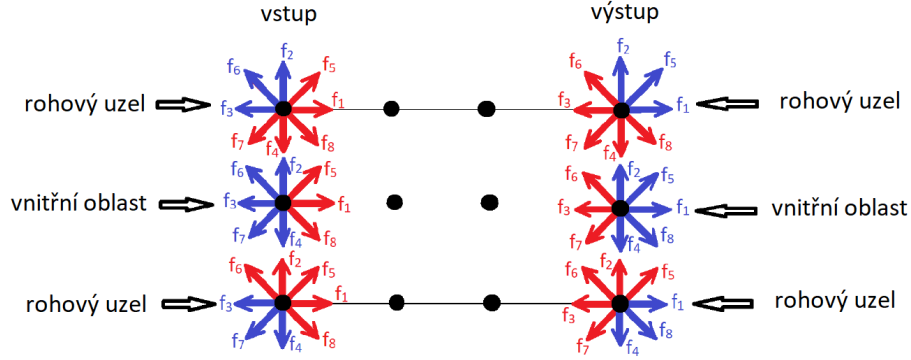
Jestliže vazká tekutina interaguje se stěnou, pak se její rychlost na stěně uvažuje nulová $\tilde{\mathbf{v}} = 0$. Z rovnice (2.4.2) zůstanou pouze členy

$$\boxed{f_8 = f_6}. \quad (2.4.3)$$

Analogický postup lze provést pro všechny zbylé distribuční funkce f_4, f_7 a f_2, f_5, f_6 , které se nacházejí v oblasti okrajových podmínek na pevné stěně, viz obr. 8.

Okrajové podmínky na vstupu a výstupu

Během numerické simulace proudění ve 2D kanále nastává problém v uzlech na vstupu a výstupu čili vstupu a výstupu. Na obr. 9 je znázorněna situace, která nastává bezprostředně po propagaci. Modře znázorněné distribuční funkce jsou známé a červeně neznámé.



Obr. 9 : Schéma realizace okrajových podmínek na vstupu a výstupu

Pro určení okrajových podmínek na vstupu a výstupu se nejčastěji používá okrajová podmínka typu bounceback pro nerovnovážné distribuční funkce. Využívá se také znalosti předepsaných rychlostí, tlaků nebo principu extrapolace tzn. znalosti makroskopických veličin sousedních uzlů výpočtové mříže. Tomuto způsobu se říká rychlostní nebo také tlaková okrajová podmínka podle toho, jaká veličina je na vstupu nebo výstupu předepsána. Jako příklad vezměme výstup z kanálu, který lze podle obr. 9 rozdělit na dvě entity a to vnitřní oblast okrajových podmínek a dva rohové uzly. Podle Zou a He [10] lze tyto okrajové podmínky odvodit ze vztahů pro makroskopické veličiny a z principu okrajové podmínky typu bounceback. Nejprve odvoďme okrajové podmínky pro vnitřní oblast výstupu. Jedna z neznámých distribučních funkcí je f_3 , která se nejsnáze odvodí následovně

$$f_3 - f_3^{eq} = f_1 - f_1^{eq}. \quad (2.4.4)$$

Rovnovážné funkce f_3^{eq}, f_1^{eq} rozepíšeme podle vztahu (2.2.4)

$$f_3 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3 \frac{(\mathbf{e}_3 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{e}_3 \tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right) = f_1 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3 \frac{(\mathbf{e}_1 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{e}_1 \tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right). \quad (2.4.5)$$

Dále rozepíšeme směrové vektory a vektory rychlosti

$$f_3 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(3 \frac{\overbrace{(-1, 0)(\tilde{v}_x, \tilde{v}_y)}^{-\tilde{v}_x}}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{\overbrace{[(-1, 0)(\tilde{v}_x, \tilde{v}_y)]^2}^{-\tilde{v}_x}}{\tilde{c}^4} \right) = f_1 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(3 \frac{\overbrace{(1, 0)(\tilde{v}_x, \tilde{v}_y)}^{\tilde{v}_x}}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{\overbrace{[(1, 0)(\tilde{v}_x, \tilde{v}_y)]^2}^{\tilde{v}_x}}{\tilde{c}^4} \right), \quad (2.4.6)$$

kde se odečte člen $\frac{9}{2} \frac{\tilde{v}_x^2}{\tilde{c}^4}$. Tím se rovnice zjednoduší na

$$f_3 + \frac{1}{3} \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}^2} = f_1 - \frac{1}{3} \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}^2}, \quad (2.4.7)$$

ze které vyjádříme hledanou funkci f_3

$$\boxed{f_3 = f_1 - \frac{2\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{3\tilde{c}^2}}. \quad (2.4.8)$$

Nyní vyjádříme distribuční funkce f_7 a f_6 . Tyto distribuční funkce se odvozují odlišným způsobem než f_3 . K odvození použijeme vztah pro makroskopickou rychlost

$$\sum_{i=1}^9 \tilde{c} f_i \mathbf{e}_i = \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \Rightarrow f_1 \mathbf{e}_1 + f_2 \mathbf{e}_2 + f_3 \mathbf{e}_3 + f_4 \mathbf{e}_4 + f_5 \mathbf{e}_5 + f_6 \mathbf{e}_6 + f_7 \mathbf{e}_7 + f_8 \mathbf{e}_8 + f_9 \mathbf{e}_9 = \frac{\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{v}}}{\tilde{c}}. \quad (2.4.9)$$

Pamatujme, že směrové vektory \mathbf{e}_i a vektor rychlosti $\tilde{\mathbf{v}}$ mají x -ovou a y -ovou složku. Jestliže uvažujeme laminární proudění, pak je y -ová složka vektoru rychlosti nulová. Vztah (2.4.9) se ve smyslu x -ové složky změní

$$f_1 e_1^x + f_2 e_2^x + f_3 e_3^x + f_4 e_4^x + f_5 e_5^x + f_6 e_6^x + f_7 e_7^x + f_8 e_8^x + f_9 e_9^x = \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.10)$$

Tato rovnost lze ještě zjednodušit dosazením za složky směrových vektorů následujícím způsobem

$$f_1 \overbrace{e_1^x}^1 + f_2 \overbrace{e_2^x}^0 + f_3 \overbrace{e_3^x}^{-1} + f_4 \overbrace{e_4^x}^0 + f_5 \overbrace{e_5^x}^1 + f_6 \overbrace{e_6^x}^{-1} + f_7 \overbrace{e_7^x}^{-1} + f_8 \overbrace{e_8^x}^1 + f_9 \overbrace{e_9^x}^0 = \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.11)$$

Z rovnice tedy zůstanou jen některé členy

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.12)$$

Účelně přesuneme hledané distribuční funkce f_7 a f_6 na levou stranu rovnice a získáme jednu z klíčových rovnic pro jejich odvození

$$f_6 + f_7 = f_1 + f_5 + f_8 - f_3 - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.13)$$

Distribuční funkce f_3 je již známa, a proto ji dosadíme do rovnice (2.4.13)

$$f_6 + f_7 = f_1 + f_5 + f_8 - f_1 + \frac{2\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{3\tilde{c}^2} - \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{\tilde{c}}, \quad (2.4.14)$$

která se ještě zjednoduší na

$$f_6 + f_7 = f_5 + f_8 - \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{3\tilde{c}}. \quad (2.4.15)$$

Získali jsme jednu rovnici pro dvě neznámé f_6 a f_7 . Druhá rovnice také vychází z rovnosti (2.4.10), ale ve smyslu směru y . Jestliže ji důkladně rozepíšeme a uvažujeme laminární proudění $\tilde{v}_y = 0$, rovnice se zjednoduší

$$f_1 \overbrace{e_1^y}^0 + f_2 \overbrace{e_2^y}^1 + f_3 \overbrace{e_3^y}^0 + f_4 \overbrace{e_4^y}^{-1} + f_5 \overbrace{e_5^y}^1 + f_6 \overbrace{e_6^y}^1 + f_7 \overbrace{e_7^y}^{-1} + f_8 \overbrace{e_8^y}^{-1} + f_9 \overbrace{e_9^y}^0 = \frac{\tilde{\rho} \overbrace{\tilde{v}_y}^0}{\tilde{c}},$$

$$\Rightarrow f_6 + f_2 + f_5 = f_7 + f_4 + f_8. \quad (2.4.16)$$

V této rovnici se vyskytují hledané distribuční funkce, a proto jednu z nich vyjádříme

$$f_6 = f_7 + f_4 + f_8 - f_2 - f_5, \quad (2.4.17)$$

dosadíme do výrazu (2.4.15)

$$f_7 + f_4 + f_8 - f_2 - f_5 + f_7 = f_5 + f_8 - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{3\tilde{c}}, \quad (2.4.18)$$

a následnými algebraickými úpravami získáme vztah pro hledanou distribuční funkci f_7

$$\boxed{f_7 = f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{6\tilde{c}}}. \quad (2.4.19)$$

Ze znalosti distribuční funkce f_7 již není obtížné odvodit vztah pro poslední hledanou distribuční funkci f_6 , dosazením (2.4.19) do vztahu (2.4.15)

$$f_6 + f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{6\tilde{c}} = f_5 + f_8 - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{3\tilde{c}}, \quad (2.4.20)$$

a následnými algebraickými úpravami ji vyjádřit

$$\boxed{f_6 = f_8 - \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{6\tilde{c}}}. \quad (2.4.21)$$

Hledané distribuční funkce pro vnitřní oblast výstupu jsou známy, zbývá určit neznámé distribuční funkce pro rohové uzly výstupu. Určíme je nejprve pro dolní rohový uzel výstupu. Opět uvažujeme okrajovou podmínku typu bounceback pro distribučních funkce f_3 a f_1

$$f_3 - f_3^{eq} = f_1 - f_1^{eq}. \quad (2.4.22)$$

Jestliže ji důkladně rozepíšeme

$$f_3 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3 \frac{(\mathbf{e}_3 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{e}_3 \tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right) = f_1 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3 \frac{(\mathbf{e}_1 \tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{e}_1 \tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right), \quad (2.4.23)$$

a uvažujeme nulový vektor makroskopické rychlosti na stěně $\tilde{\mathbf{v}} = 0$. Získáme jednoduchý vztah

$$\boxed{f_3 = f_1.} \quad (2.4.24)$$

Totožný postup provedeme v případě distribučních funkcí f_2 a f_4 , pro které získáme

$$\boxed{f_2 = f_4.} \quad (2.4.25)$$

Stejně jako pro vnitřní oblast i pro rohové uzly platí vztah pro makroskopickou rychlost ve směru osy x (2.4.12)

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.26)$$

Ze znalosti rovnosti $f_3 = f_1$ a nulového vektoru makroskopické rychlosti na stěně $\tilde{\mathbf{v}} = 0$ se tato rovnice zjednoduší

$$f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = 0, \quad (2.4.27)$$

kde účelně vyjádříme f_6

$$f_6 = f_5 + f_8 - f_7. \quad (2.4.28)$$

I zde platí vztah pro makroskopickou rychlost ve směru y (2.4.16)

$$f_6 + f_2 + f_5 = f_7 + f_4 + f_8. \quad (2.4.29)$$

Dosadíme-li do této rovnosti vztah (2.4.28)

$$f_5 + f_8 - f_7 + f_2 + f_5 = f_7 + f_4 + f_8, \quad (2.4.30)$$

kde $f_2 = f_4$, získáme další jednoduchou rovnost

$$\boxed{f_7 = f_5.} \quad (2.4.31)$$

Vrátíme-li se ještě k rovnosti (2.4.27) a využijeme-li vztah $f_7 = f_5$, získáme tím jednoduchou rovnost

$$\boxed{f_6 = f_8.} \quad (2.4.32)$$

Tyto jednoduché rovnosti jsou v podstatě okrajové podmínky typu bounceback v oblasti stěn. Jak lze na obr. 9 vidět, problém nastává u distribučních funkcí f_5 a f_7 . Tyto funkce nemají některé sousední uzly výpočtové mříže, na které by se mohly přesunout, nebo naopak, ze kterých by se mohly distribuční funkce přesouvat. Proto se jedna z nich musí určit na základě již odvozených vztahů pro okrajové podmínky a makroskopické veličiny. K tomuto odvození je užitečný vztah pro makroskopickou hustotu (2.3.11). Pro ni platí

$$\sum_{i=1}^9 f_i = \tilde{\rho} \Rightarrow f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 = \tilde{\rho}. \quad (2.4.33)$$

Ze znalosti odvozených vztahů pro dolní rohový uzel výstupu $f_3 = f_1$, $f_2 = f_4$, $f_7 = f_5$ a $f_6 = f_8$ se vztah pro hustotu zjednoduší

$$f_1 + \overbrace{f_2}^{f_4} + \overbrace{f_3}^{f_1} + f_4 + f_5 + \overbrace{f_6}^{f_8} + \overbrace{f_7}^{f_5} + f_8 + f_9 = \tilde{\rho}. \quad (2.4.34)$$

Algebraickými úpravami vyjádříme hledanou distribuční funkci f_5

$$f_5 = \frac{1}{2} (\tilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_8). \quad (2.4.35)$$

Nyní jsou známy všechny distribuční funkce k definování dolního rohového uzlu výstupu. Pro určení neznámých distribučních funkcí horního rohového uzlu výstupu platí totožné vztahy týkající se okrajové podmínky typu bounceback

$$\boxed{f_3 = f_1}, \quad (2.4.36)$$

$$\boxed{f_2 = f_4}, \quad (2.4.37)$$

$$\boxed{f_7 = f_5}, \quad (2.4.38)$$

$$\boxed{f_6 = f_8}. \quad (2.4.39)$$

Změna nastane u distribučních funkcí, které nemají některé ze sousedních uzlů výpočtové mříže. Jsou to funkce f_6 a f_8 . Stejně jako v dolním rohovém uzlu i zde musíme jednu z nich určit. Protože mezi oběma rohovými uzly platí přímá analogie, využijeme k tomu již odvozený vztah pro funkci f_5 (2.4.35)

$$f_5 = \frac{1}{2} (\tilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_8), \quad (2.4.40)$$

kde jednoduše vyjádříme požadovanou funkci f_8

$$\boxed{f_8 = \frac{1}{2} (\tilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_5)}. \quad (2.4.41)$$

Definováním horního rohového uzlu jsou známy všechny distribuční funkce k úplnému definování okrajových podmínek pro výstup.

K určení okrajových podmínek vstupu platí naprosto totožný sled odvození s rozdílem v hledaných distribučních funkcích. Vstup si lze představit jako zrcadlový obraz výstupu, a proto mezi nimi platí analogie. Vstup lze stejně jako výstup rozdělit na dvě entity a to vnitřní oblast okrajových podmínek a dva rohové uzly, viz obr. 9.

Analogie pro vnitřní oblast okrajových podmínek má tvar

$$\begin{array}{cc} \text{výstup} & \text{vstup} \\ f_3 = f_1 - \frac{2\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{3\widetilde{c}} \Rightarrow & \boxed{f_1 = f_3 + \frac{2\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{3\widetilde{c}}}, \end{array} \quad (2.4.42)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{6\widetilde{c}} \Rightarrow \boxed{f_5 = f_7 - \frac{(f_2 - f_4)}{2} + \frac{\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{6\widetilde{c}}}, \quad (2.4.43)$$

$$f_6 = f_8 - \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{6\widetilde{c}} \Rightarrow \boxed{f_8 = f_6 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} + \frac{\widetilde{\rho}\widetilde{v}_x}{6\widetilde{c}}}. \quad (2.4.44)$$

Pro dolní rohový uzel

$$\begin{array}{cc} \text{výstup} & \text{vstup} \\ f_3 = f_1 \Rightarrow & \boxed{f_1 = f_3}, \end{array} \quad (2.4.45)$$

$$f_2 = f_4 \Rightarrow \boxed{f_2 = f_4}, \quad (2.4.46)$$

$$f_6 = f_8 \Rightarrow \boxed{f_8 = f_6}, \quad (2.4.47)$$

$$f_7 = f_5 \Rightarrow \boxed{f_7 = f_5}, \quad (2.4.48)$$

$$f_5 = \frac{1}{2}(\widetilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_8) \Rightarrow \boxed{f_8 = \frac{1}{2}(\widetilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_5)}. \quad (2.4.49)$$

Pro horní rohový uzel

$$\begin{array}{cc} \text{výstup} & \text{vstup} \\ f_3 = f_1 \Rightarrow & \boxed{f_1 = f_3}, \end{array} \quad (2.4.50)$$

$$f_4 = f_2 \Rightarrow \boxed{f_4 = f_2}, \quad (2.4.51)$$

$$f_6 = f_8 \Rightarrow \boxed{f_8 = f_6}, \quad (2.4.52)$$

$$f_7 = f_5 \Rightarrow \boxed{f_7 = f_5}, \quad (2.4.53)$$

$$f_8 = \frac{1}{2}(\widetilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_5) \Rightarrow \boxed{f_5 = \frac{1}{2}(\widetilde{\rho} - f_9 - 2f_4 - 2f_1 - 2f_8)}. \quad (2.4.54)$$

Dosud byly odvozeny vztahy pouze pro distribuční funkce. V nich ovšem figurují neznámé veličiny jako je makroskopická rychlost \widetilde{v}_x a hustota $\widetilde{\rho}$. Tyto makroskopické veličiny musí být pro výpočet okrajových podmínek známy, ale pro jejich zjištění nemohou být použity standardní vztahy (2.3.11) a (2.3.12), protože nejsou známy všechny distribuční funkce v uzlech na vstupu a výstupu výpočtové mříže. Pouze

pro vnitřní oblast vstupu a výstupu lze odvodit vztah mezi makroskopickou rychlostí a hustotou pomocí vztahů (2.3.11) a (2.3.12). Ze vztahu (2.4.33) platí

$$f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 = \tilde{\rho}, \quad (2.4.55)$$

a ze vztahu (2.4.12)

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\tilde{\rho} \tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.56)$$

Sečtením těchto rovnic

$$2f_1 + f_2 + f_4 + 2f_5 + 2f_8 + f_9 = \tilde{\rho} \left(1 + \frac{\tilde{v}_x}{\tilde{c}} \right), \quad (2.4.57)$$

a následnými algebraickými úpravami získáme rovnici

$$f_2 + f_4 + f_9 + 2(f_1 + f_5 + f_8) = \tilde{\rho} \left(1 + \frac{\tilde{v}_x}{\tilde{c}} \right). \quad (2.4.58)$$

Tato rovnice je klíčová k určení makroskopických veličin potřebných k definování okrajových podmínek na vnitřní oblasti vstupu a výstupu. Určení makroskopických veličin však pracuje s odlišnou myšlenkou na vstupu a výstupu.

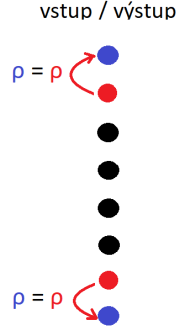
Zaměřme se na vnitřní oblast vstupu, kde se předpokládá znalost makroskopické rychlosti tekutiny nebo hustoty vyjádřené z předepsaného tlaku. Jestliže je na vnitřní oblasti vstupu předepsána rychlost, rovnice (2.4.58) má tvar

$$\tilde{\rho} = \frac{f_2 + f_4 + f_9 + 2(f_1 + f_5 + f_8)}{1 + \frac{\tilde{v}_x}{\tilde{c}}}. \quad (2.4.59)$$

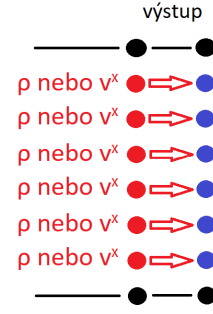
Jestliže je na vnitřní oblasti vstupu známa makroskopická hustota, rovnice (2.4.58) se změní na

$$\tilde{v}_x = -\tilde{c} + \tilde{c} \frac{(f_2 + f_4 + f_9 + 2(f_1 + f_5 + f_8))}{\tilde{\rho}}. \quad (2.4.60)$$

Pro určení okrajových podmínek obou rohových uzlů vstupu je potřeba pouze makroskopická hustota. Pro její algebraické určení neexistuje žádný vztah. Využívá se neměnnosti hodnoty makroskopické hustoty podél příčného řezu kanálem. Můžeme ji proto extrapolovat ze sousedního uzlu výpočtové mříže, viz obr. 9.



Obr. 10 : Extrapolace
makroskopické hustoty pro uzly v
rozích



Obr. 11 : Extrapolace
makroskopické hustoty nebo
rychlosti pro vnitřní oblast výstupu

Odlišná myšlenka je používána k určení hledaných makroskopických veličin vnitřní oblasti výstupu, kde musí být zachována návaznost na děje, které se během proudění ve 2D kanálu udály. Návaznost spolehlivě zajišťuje extrapolace ze sousedního uzlu výpočtové mříže, viz obr. 11. Extrapolaci lze realizovat dvěma způsoby. Extrapoluje-li se makroskopická rychlost, rovnice (2.4.58) má tvar

$$\tilde{\rho} = \frac{f_2 + f_4 + f_9 + 2(f_1 + f_5 + f_8)}{1 + \frac{\tilde{v}_x}{c}}. \quad (2.4.61)$$

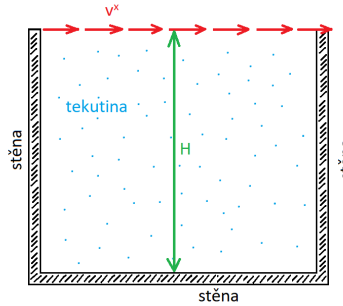
Extrapoluje-li se makroskopická hustota, tvar rovnice (2.4.58) se změní na

$$\tilde{v}_x = -\tilde{c} + \tilde{c} \frac{(f_2 + f_4 + f_9 + 2(f_1 + f_5 + f_8))}{\tilde{\rho}}. \quad (2.4.62)$$

K určení makroskopické hustoty v rohových uzlech výstupu se opět využívá neměnnosti hustoty podél příčného řezu kanálem, viz obr. 10.

2.4.2 Okrajové podmínky pro proudění v kavitě

Uvažujme tekutinu uzavřenou v otevřené čtvercové nádobě naplněné po okraj, viz obr. 12.

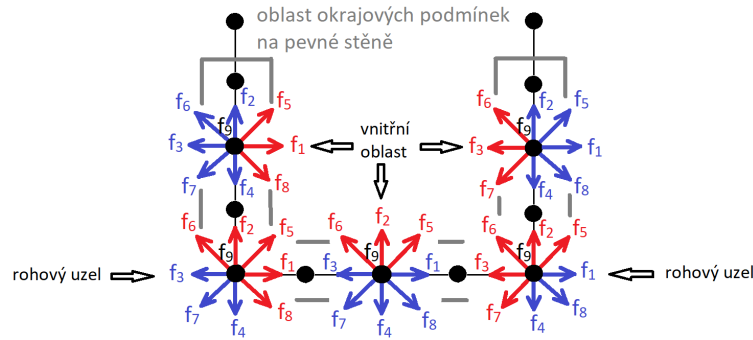


Obr. 12 : Schéma uvažované výpočtové oblasti

Hladině tekutiny je udělena počáteční rychlost, tudíž se uvnitř kavity utvoří recirkulační zóna se sekundárním prouděním. Je předpokládána znalost hustoty tekutiny a charakteristický rozměr.

Okrajové podmínky na pevné nepropustné stěně

Obdobně jako v případě proudění ve 2D kanálu zde dochází k interakci tekutiny s pevným povrchem. Pro určení červeně vyznačených neznámých distribučních funkcí se také využívá okrajové podmínky typu bounceback, viz obr. 13. Pro vnitřní oblast okrajových podmínek platí jednoduché rovnosti, jako je tomu v případě proudění ve 2D kanálu.



Obr. 13 : Schéma realizace okrajových podmínek na pevné stěně

Pro vnitřní oblast okrajových podmínek na levé stěně jsou to rovnosti

$$f_1 = f_3, \quad (2.4.63)$$

$$f_5 = f_7, \quad (2.4.64)$$

$$f_8 = f_6. \quad (2.4.65)$$

Pro vnitřní oblast okrajových podmínek na pravé stěně

$$f_3 = f_1, \quad (2.4.66)$$

$$f_6 = f_8, \quad (2.4.67)$$

$$f_7 = f_5. \quad (2.4.68)$$

A pro vnitřní oblast okrajových podmínek na dolní stěně

$$f_2 = f_4, \quad (2.4.69)$$

$$f_5 = f_7, \quad (2.4.70)$$

$$f_6 = f_8. \quad (2.4.71)$$

Problémové může být definování okrajových podmínek v rohových uzlech výpočetní mříže. Jedná se o místa, kde se stýkají pevné stěny, tudíž platí okrajové podmínky typu bounceback pro všechny distribuční funkce. Pro levý rohový uzel platí

$$f_1 = f_3, \quad (2.4.72)$$

$$f_2 = f_4, \quad (2.4.73)$$

$$f_5 = f_7, \quad (2.4.74)$$

$$f_6 = f_8. \quad (2.4.75)$$

A pro pravý rohový uzel platí

$$f_3 = f_1, \quad (2.4.76)$$

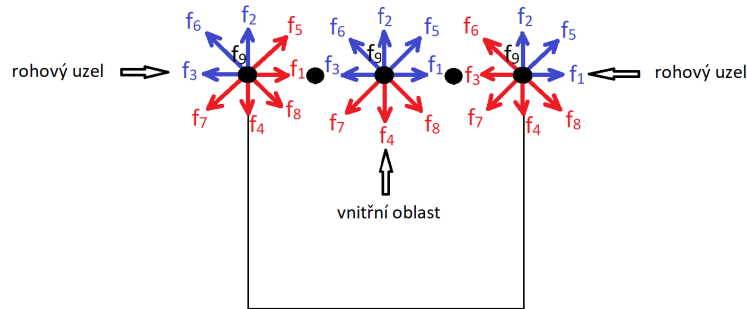
$$f_2 = f_4, \quad (2.4.77)$$

$$f_6 = f_8, \quad (2.4.78)$$

$$f_5 = f_7. \quad (2.4.79)$$

Okrajové podmínky na vstupu

Tyto okrajové podmínky se odvozují podle stejného principu jako okrajové podmínky v případě proudění ve 2D kanálu. Rozdílný je směr vektoru počáteční makroskopické rychlosti. Okrajové podmínky lze rozdělit na dvě entity a to vnitřní oblast okrajových podmínek a dva rohové uzly. Neznámé distribuční funkce jsou vyznačeny červeně, viz obr. 14.



Obr. 14 : Schéma realizace okrajových podmínek na vstupu

Jednou z neznámých distribučních funkcí vnitřní oblasti okrajových podmínek je f_4 . Určíme ji z principu okrajové podmínky typu bounceback

$$f_4 - f_4^{eq} = f_2 - f_2^{eq}, \quad (2.4.80)$$

kde opět podrobně rozepíšeme rovnovážné distribuční funkce f_4^{eq} a f_2^{eq} a získáme

$$f_4 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3\frac{(\mathbf{e}_4\tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2}\frac{(\mathbf{e}_4\tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2}\frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right) = f_2 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(1 + 3\frac{(\mathbf{e}_2\tilde{\mathbf{v}})}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2}\frac{(\mathbf{e}_2\tilde{\mathbf{v}})^2}{\tilde{c}^4} - \frac{3}{2}\frac{\tilde{\mathbf{v}}^2}{\tilde{c}^2} \right). \quad (2.4.81)$$

Dále rozepíšeme směrové vektory a vektory makroskopické rychlosti

$$f_4 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(3\frac{(0, -1)(\tilde{v}_x, 0)}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2}\frac{[(0, -1)(\tilde{v}_x, 0)]^2}{\tilde{c}^4} \right) = f_2 - \frac{1}{9}\tilde{\rho} \left(3\frac{(0, 1)(\tilde{v}_x, 0)}{\tilde{c}^2} + \frac{9}{2}\frac{[(0, 1)(\tilde{v}_x, 0)]^2}{\tilde{c}^4} \right), \quad (2.4.82)$$

kde \tilde{v}_y je rovno nule, protože hladina kapaliny proudí pouze v horizontálním směru. Po roznásobení se tato rovnice zjednoduší na

$$\boxed{f_4 = f_2}. \quad (2.4.83)$$

K určení neznámé distribuční funkce f_7 využijeme vztah pro makroskopickou rychlost ve směru osy x (2.4.12)

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{\tilde{c}}, \quad (2.4.84)$$

a také ve směru osy y (2.4.16), ve které je zahrnuta rovnost $f_4 = f_2$ a nulová makroskopická rychlost $\tilde{v}_y = 0$

$$f_5 + f_6 - f_7 - f_8 = 0. \quad (2.4.85)$$

Sečtením těchto dvou rovnic získáme

$$f_1 - f_3 + 2f_5 - 2f_7 = \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{\tilde{c}}. \quad (2.4.86)$$

Algebraickými úpravami získáme tvar pro hledanou distribuční funkci

$$\boxed{f_7 = f_5 + \frac{f_1 - f_3}{2} - \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{2\tilde{c}}}. \quad (2.4.87)$$

Ze znalosti distribuční funkce f_7 lze vyjádřit zbývající neznámou distribuční funkci dosazením (2.4.87) do (2.4.85)

$$f_5 + f_6 - f_5 - \frac{f_1 - f_3}{2} + \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{2\tilde{c}} - f_8 = 0, \quad (2.4.88)$$

odkud vyjádříme f_8 a získáme vztah

$$\boxed{f_8 = f_6 - \frac{f_1 - f_3}{2} + \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}_x}{2\tilde{c}}}. \quad (2.4.89)$$

Tímto jsou známy všechny hledané distribuční funkce pro vnitřní oblast okrajových podmínek na vstupu.

K určení levého rohového uzlu využijeme již odvozený vztah pro distribuční funkci f_4 (2.4.83)

$$f_4 - f_4^{eq} = f_2 - f_2^{eq} \Rightarrow \boxed{f_4 = f_2.} \quad (2.4.90)$$

Stejným způsobem bychom postupovali i v případě f_1, f_5 a f_8 , pro které by platilo

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \Rightarrow \boxed{f_1 = f_3,} \quad (2.4.91)$$

$$f_5 - f_5^{eq} = f_7 - f_7^{eq} \Rightarrow \boxed{f_5 = f_7,} \quad (2.4.92)$$

$$f_8 - f_8^{eq} = f_6 - f_6^{eq} \Rightarrow \boxed{f_8 = f_6.} \quad (2.4.93)$$

Stejně jako u okrajových podmínek pro vstup a výstup v případě proudění ve 2D kanálu zde nastává problém u distribučních funkcí f_5 a f_7 . Jednu z nich vyjádříme na základě vztahu pro makroskopickou hustotu

$$f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 = \tilde{\rho}, \quad (2.4.94)$$

kde ze znalosti rovností $f_1 = f_3$, $f_4 = f_2$, $f_5 = f_7$ a $f_8 = f_6$ získáme

$$2f_2 + 2f_3 + 2f_6 + 2f_7 + f_9 = \tilde{\rho}, \quad (2.4.95)$$

kterou algebraicky upravíme na hledanou distribuční funkci

$$\boxed{f_7 = -f_2 - f_3 - f_6 - \frac{f_9}{2} + \frac{\tilde{\rho}}{2}.} \quad (2.4.96)$$

Tímto jsou definovány neznámé distribuční funkce pro levý rohový uzel. Opět platí přímá analogie mezi levým a pravým rohovým uzlem. Pro pravý rohový uzel platí

$$\boxed{f_4 = f_2,} \quad (2.4.97)$$

$$\boxed{f_3 = f_1,} \quad (2.4.98)$$

$$\boxed{f_7 = f_5,} \quad (2.4.99)$$

$$\boxed{f_8 = f_6.} \quad (2.4.100)$$

Distribuční funkce f_8 nebo f_6 , ve kterých nastává problém z důvodu chybějícího sousedního uzlu výpočtové mříže vyjádříme ze vztahu (2.4.96)

$$f_7 = -f_2 - f_3 - f_6 - \frac{f_9}{2} + \frac{\tilde{\rho}}{2}, \quad (2.4.101)$$

kde lze vyjádřit funkci f_6

$$f_6 = -f_2 - f_3 - f_7 - \frac{f_9}{2} + \frac{\tilde{\rho}}{2}. \quad (2.4.102)$$

Nyní jsou definovány všechny neznámé distribuční funkce v oblasti okrajových podmínek na vstupu v případě proudění ve 2D kavitě. Ve vztazích opět figuruje makroskopická rychlost \tilde{v}_x a hustota $\tilde{\rho}$. Pro tyto makroskopické veličiny existuje algebraické vyjádření, které platí pouze pro vnitřní oblast okrajových podmínek. Pro odvození se využívá vztah pro makroskopickou hustotu

$$f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 = \tilde{\rho}, \quad (2.4.103)$$

a vztah pro makroskopickou rychlost (2.4.16) ve směru osy y , ve kterém je navíc zahrnuta rovnost $f_4 = f_2$

$$f_5 + f_6 - f_7 - f_8 = 0. \quad (2.4.104)$$

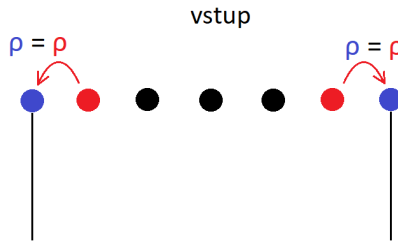
Sečtením těchto dvou vztahů získáme

$$f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + 2f_5 + 2f_6 + f_9 = \tilde{\rho}. \quad (2.4.105)$$

Zavedeme-li do tohoto vztahu rovnost $f_4 = f_2$ a algebraicky upravíme, získáme hledaný výraz pro makroskopickou hustotu

$$\tilde{\rho} = f_1 + f_3 + f_9 + 2(f_2 + f_5 + f_6). \quad (2.4.106)$$

Pro makroskopickou hustotu v rohových uzlech platí obdobný princip extrapolace, jako je tomu v případě proudění tekutiny ve 2D kanálu. Makroskopická hustota v rohovém uzlu je rovna makroskopické hustotě sousedního uzlu výpočtové mříže, viz obr. 15.



Obr. 15 : Extrapolace pro uzly v rozích

Tímto je zcela definována oblast okrajových podmínek na vstupu v případě proudění tekutiny ve 2D kavitě.

2.5 Podobnostní modelování

Lattice Boltzmannovu metodu lze aplikovat na reálné problémy, avšak musí být přesně zachováno propojení mezi reálným problémem a modelovaným problémem. Jelikož simulace nějakého reálného problému ve fyzikálních jednotkách může vyžadovat obrovské množství výpočetní paměti a je tak časově náročná, pracuje lattice Boltzmannova metoda s vlastními jednotkami. V této práci jsou fyzikální jednotky značeny jako obvykle, například rychlost v , kdežto lattice Boltzmannovy jednotky jsou značeny pomocí tildy například hustota $\tilde{\rho}$. Aby model v lattice Boltzmannových jednotkách odpovídal modelu ve fyzikálních jednotkách, využívá se tzv. podobnostního modelování. Jeho princip spočívá v definování bezrozměrných konverzních faktorů, které si lze představit jako převody udávající konstantní poměr mezi fyzikálními a lattice Boltzmannovými jednotkami. Tyto poměry mají pro obecnou veličinu tvar [11]

$$\underbrace{Q}_{\text{fyzikální veličina}} = \underbrace{\tilde{Q}}_{\text{LB veličina}} \cdot \underbrace{C_Q}_{\text{konverzní faktor}}, \quad (2.5.1)$$

kde Q, \tilde{Q} může zastupovat např. charakteristický rozměr, hustotu nebo rychlost v odpovídajících jednotkách.

K určení těchto vztahů se využívá znalosti předepsaných fyzikálních veličin výpočtového modelu, ale i volby některých veličin. Existuje více způsobů jak plně definovat vztahy mezi lattice Boltzmannovými a fyzikálními jednotkami, avšak některé vedou ke zbytečným komplikacím. V této práci je podrobně představen způsob, který je z hlediska volitelných veličin a vyvarování se komplikací nejprůběžnější. Předpokládejme znalost charakteristického rozměru výpočtového modelu, např. výška H kanálu nebo kavity. Výpočtová oblast je diskretizována mříží a počet uzlů podél charakteristického rozměru je roven charakteristickému rozměru \tilde{H} . Pro rozměr platí vztah

$$H = \tilde{H}C_H \Rightarrow C_H = \frac{H}{\tilde{H}}, \quad (2.5.2)$$

kde C_H je hledaný konverzní faktor pro rozměr. Nadále předpokládejme znalost hustoty tekutiny ρ ve fyzikálních jednotkách, přičemž je známa i hustota v lattice Boltzmannových jednotkách $\tilde{\rho}$, která se volí rovna jedné. Pro konverzní faktor hustoty platí

$$\rho = \tilde{\rho}C_\rho \Rightarrow C_\rho = \frac{\rho}{\tilde{\rho}}. \quad (2.5.3)$$

Nyní zvolme hodnotu relaxačního času τ , která se nesmí blížit $\frac{1}{2}$. V této práci je nejčastěji volen z intervalu

$$\tau \in (0, 5; 0, 6). \quad (2.5.4)$$

Ve vztazích v odstavcích 2.2 až 2.4 se vyskytuje mřížová rychlost $\tilde{c} = \frac{d\tilde{x}}{dt}$, která komplikuje jejich výpočet. Vhodnou volbou délkového kroku $d\tilde{x} = 1$ a časového

roku $d\tilde{t} = 1$ se vztahy výrazně zjednoduší. Pro příslušné konverzní faktory pak ale platí

$$dx = \overbrace{d\tilde{x}}^1 C_H \Rightarrow dx = C_H, \quad (2.5.5)$$

$$dt = \overbrace{d\tilde{t}}^1 C_t \Rightarrow dt = C_t, \quad (2.5.6)$$

kde konverzní faktor pro rozměr C_H je známý, ale konverzní faktor pro čas C_t není. K jeho určení se využívá vztah (2.1.13) s předpokladem známé kinematické vizkozity

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} c^2 dt, \quad (2.5.7)$$

který má po rozepsání tvar

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{dx^2}{dt}. \quad (2.5.8)$$

Zavedením vztahů pro dx a dt se změní na

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_H^2}{C_t}, \quad (2.5.9)$$

odkud již lze vyjádřit hledaný konverzní faktor pro čas

$$C_t = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_H^2}{\nu}. \quad (2.5.10)$$

Nyní vyjádříme konverzní faktor pro rychlost pomocí konverzních faktorů, které jsou již známy. Vyjdeme z jednoduché myšlenky

$$\text{rychlost} = \frac{\text{rozměr}}{\text{čas}} \Rightarrow C_v = \frac{C_H}{C_t}, \quad (2.5.11)$$

kde C_v je hledaný konverzní faktor pro rychlost. Pomocí něj lze určit rychlost v lattice Boltzmannových jednotkách tak, aby odpovídala předepsané rychlosti na vstupu. Platí pro ni vztah

$$v = \tilde{v} C_v \Rightarrow \tilde{v} = \frac{v}{C_v}, \quad (2.5.12)$$

kde v je předepsaná rychlost ve fyzikálních jednotkách a \tilde{v} je rychlost v lattice Boltzmannových jednotkách. Zde je nutno poznamenat, že \tilde{v} by měla být pro simulaci nestlačitelné vazké kapaliny < 0.3 [11].

Zbývá určit konverzní faktor pro kinematickou vizkozitu a pomocí něj určit kinematickou vizkozitu v lattice Boltzmannových jednotkách. K určení tohoto konverzního faktoru se používá Reynoldsovo podobnostní číslo, jehož hodnota je stejná jak ve fyzikálních jednotkách, tak i v lattice Boltzmannových jednotkách. Tedy platí

$$Re = \widetilde{Re} \Rightarrow \frac{uH}{\nu} = \frac{\tilde{v}\tilde{H}}{\tilde{\nu}}. \quad (2.5.13)$$

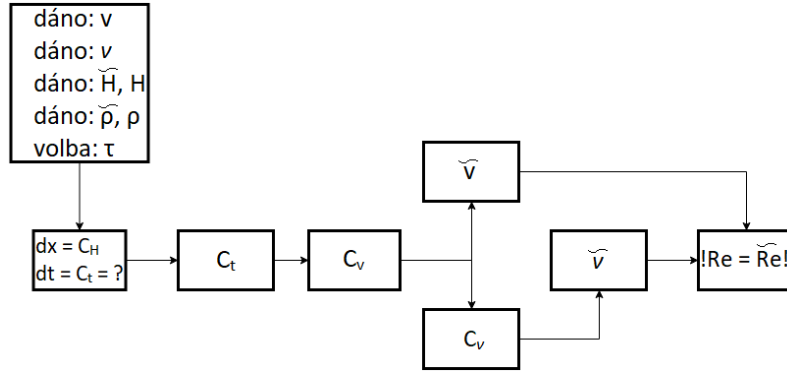
Tento vztah algebraicky upravíme, aby sobě odpovídající veličiny byly ve zlomku vždy nad sebou

$$\frac{\overbrace{\nu}^{C_\nu}}{\widetilde{\nu}} = \frac{\overbrace{v}^{C_v}}{\widetilde{v}} \frac{\overbrace{H}^{C_H}}{\widetilde{H}} \Rightarrow C_\nu = C_v C_H, \quad (2.5.14)$$

kde C_ν je hledaný konverzní faktor pro kinematickou vizkozitu. Pro neznámou kinematickou vizkozitu v lattice Boltzmannových jednotkách platí

$$\widetilde{\nu} = \frac{\nu}{C_\nu}. \quad (2.5.15)$$

Tímto jsme definovali všechny potřebné konverzní faktory. Pro přehlednost je ještě jednou schématicky naznačen algoritmus předešlého postupu.



Obr. 16 : Schéma uvedeného podobnostního modelování

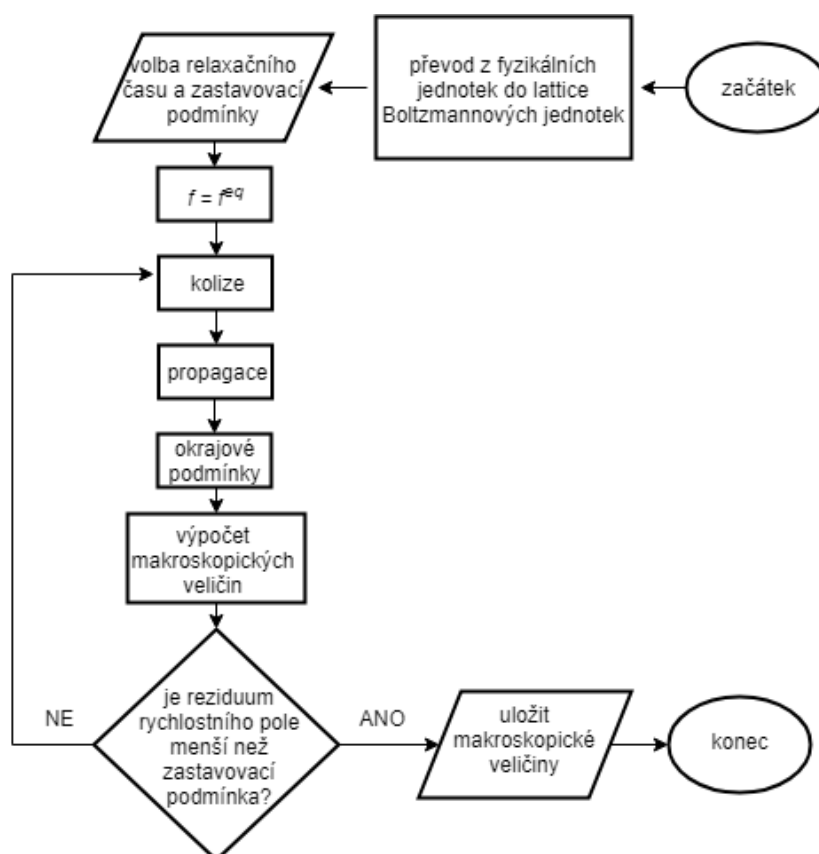
3 Implementace lattice Boltzmannovy metody a numerické výsledky

V odstavci 2. je popsán princip lattice Boltzmannovy metody. V tomto odstavci je ve vývojovém diagramu schématicky naznačen algoritmus lattice Boltzmannovy metody. Dále jsou vlastní dosažené numerické výsledky v případě proudění kapaliny ve 2D kavitě porovnány s numerickými výsledky publikovanými v literatuře a v případě proudění v horizontálním 2D kanálu jsou porovnány s analytickým řešením. Jako vývojové prostředí je v této práci použito výpočtové prostředí MATLAB.

3.1 Algoritmus

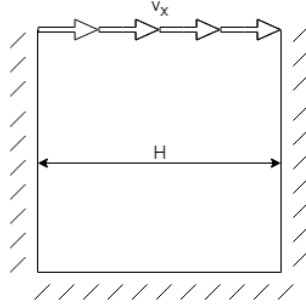
Předpokládejme znalost fyzikálního problému například rychlost tekutiny, rozměr výpočtové oblasti a hustotu tekutiny. Veličiny ve fyzikálních jednotkách je potřeba převést do lattice Boltzmannových jednotek a zvolit relaxační čas (platí pro SRT i MRT modely). Vzhledem k úspoře času je vhodné zvolit zastavovací podmínku,

která zastaví reziduum sledující proměnlivost rychlostního pole výpočtové oblasti. Při inicializaci se distribuční funkce rovnají rovnovážným distribučním funkcím, protože je tekutina v klidu. Po inicializaci se uskuteční kolizní fáze v každém uzlu výpočetní mříže. Následně se v každém uzlu realizuje propagace. K určení neznámých distribučních funkcí na okrajích výpočtové oblasti se použijí okrajové podmínky a následně se spočítá reziduum rychlostního pole. Jestliže je rychlostní pole ustálené, přeruší se algoritmus a uloží se makroskopické hodnoty rychlostního pole a pole hustoty. Pro přehlednost je celý proces schématicky znázorněn ve vývojovém diagramu na obr. 17.



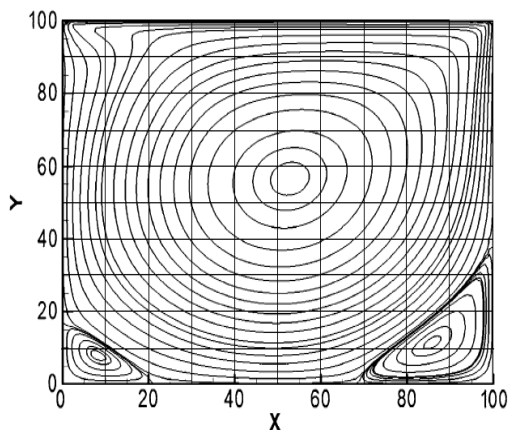
Obr. 17 : Vývojový diagram algoritmu lattice Boltzmannovy metody

3.2 Proudění nestlačitelné vazké tekutiny ve 2D kavitě

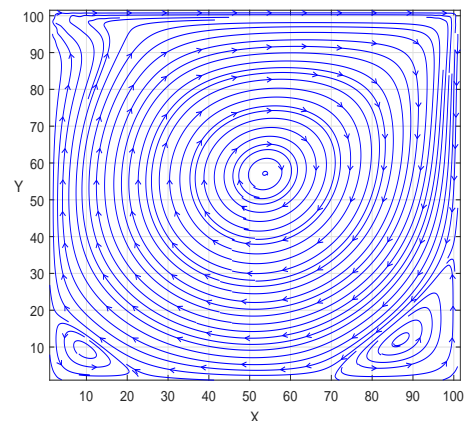


Obr. 18 : Schéma výpočtové oblasti pro 2D kavitu

V tomto odstavci je provedena numerická simulace proudění kapaliny uvnitř čtvercové nádoby, takzvané kavity. Šířka a výška kavity je $H = 20 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ a je naplněna kapalinou o hustotě $\rho = 871 \text{ kg/m}^3$ a kinematické viskozitě $\nu = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. Hladina kapaliny je uvedena do pohybu počáteční rychlostí $v_x = 6 \text{ m/s}$, viz obr. 18. K vytvoření výpočetní mříže byla výška kavity diskretizována $\tilde{H} = 100$ uzly, viz odstavec 2.5. Protože je kavita čtvercová tak i její šířka byla diskretizována 100 uzly. Namísto SRT modelu byl zvolen MRT model, protože při daných fyzikálních veličinách je Reynoldsovo číslo rovno $Re = v_x H / \nu = 1000$ a s takto vysokou hodnotou je SRT model na výpočetní mříži 100×100 na hraně stability. Důvodem této nestability je vysoká hodnota rychlosti v lattice Boltzmannových jednotkách, viz odstavec 2.5. Jako relaxační časy byly zvoleny hodnoty podle [12], kde pomocí nich autor dosáhl dobré stability. Čili pro $S_\rho = S_{jx} = S_{jy} = 1$, pro $S_e = S_\epsilon = 1,4$, pro $S_{qx} = S_{qy} = 1,2$ a pro $S_{p_{xx}} = S_{p_{yy}} = 1/\tau$, kde τ bylo zvoleno jakoby se jednalo o SRT model čili $\tau = 0,52$. Konverzní faktor pro délku má hodnotu $C_H = 0,002$ a konverzní faktor pro čas $C_t = 2,22 \cdot 10^{-5}$. Z těchto znalostí byl získán konverzní faktor pro rychlost $C_v = 90$ pomocí něhož byla spočítána rychlost v lattice Boltzmannových jednotkách $\tilde{v}_x = v_x / C_v = 0,066667$. Z platnosti $Re = \tilde{Re}$ byl získán konverzní faktor pro kinematickou viskozitu, podle kterého je kinematická viskozita v lattice Boltzmannových jednotkách rovna $C_\nu = 0,18$. K ověření správnosti numerických výsledků získaných pomocí vlastního softwaru lattice Boltzmannovy metody (na obr. 20) byly použity numerické výsledky publikované v práci [3] (na obr. 19).

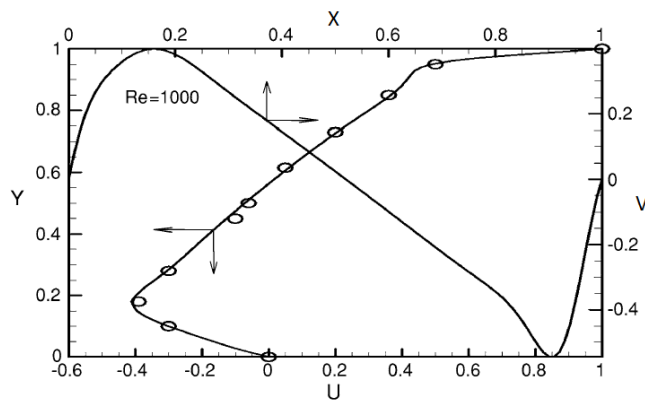


Obr. 19 : Proudnice podle autorů [3]

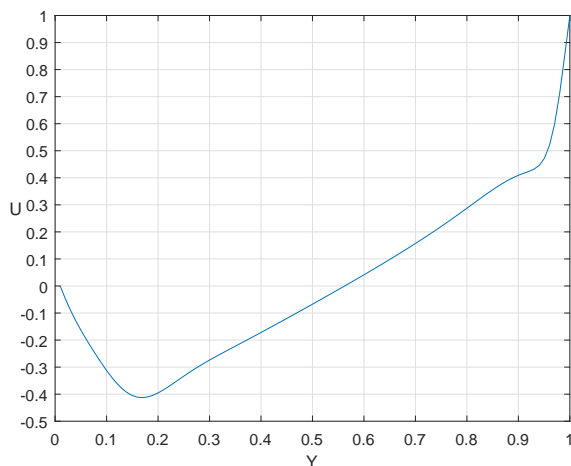


Obr. 20 : Proudnice stanovené na základě vlastní implementace lattice Boltzmannovy metody

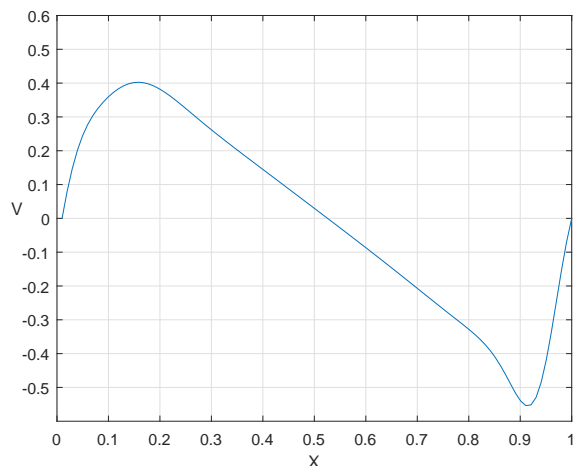
Následně byly porovnány vlastní numerické výsledky rychlostních profilů v příčném (obr. 22) a podélném (obr. 23) řezu vedeným středem kavity s numerickými výsledky publikovanými v práci [3], které autor získal pomocí metody FVM, viz obr. 21. Poznamenejme, že na obr. 22 je rychlostní profil diagonálně převrácen oproti odpovídajícímu rychlostnímu profilu na obr. 21.



Obr. 21 : Rychlostní profily podle autorů [3]



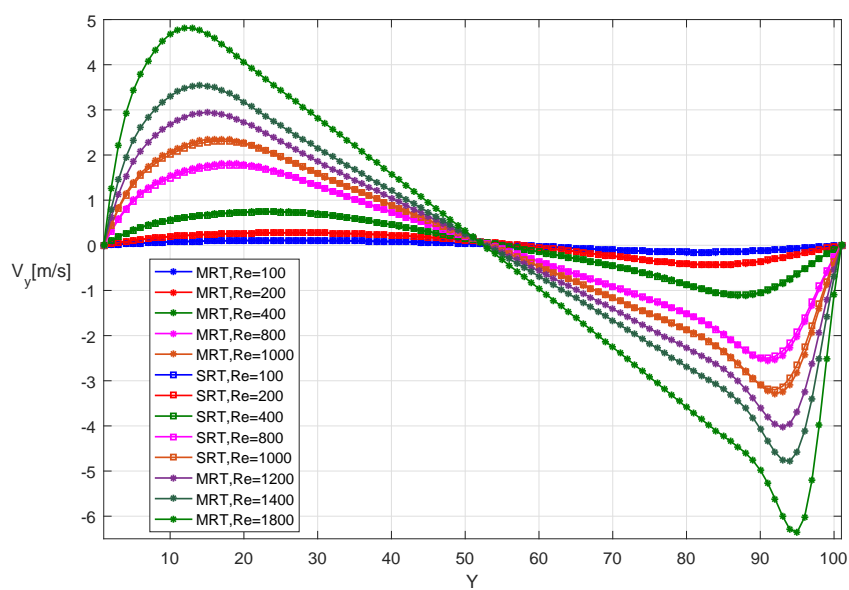
Obr. 22 : Rychlostní profil v příčném řezu získaný vlastním softwarem



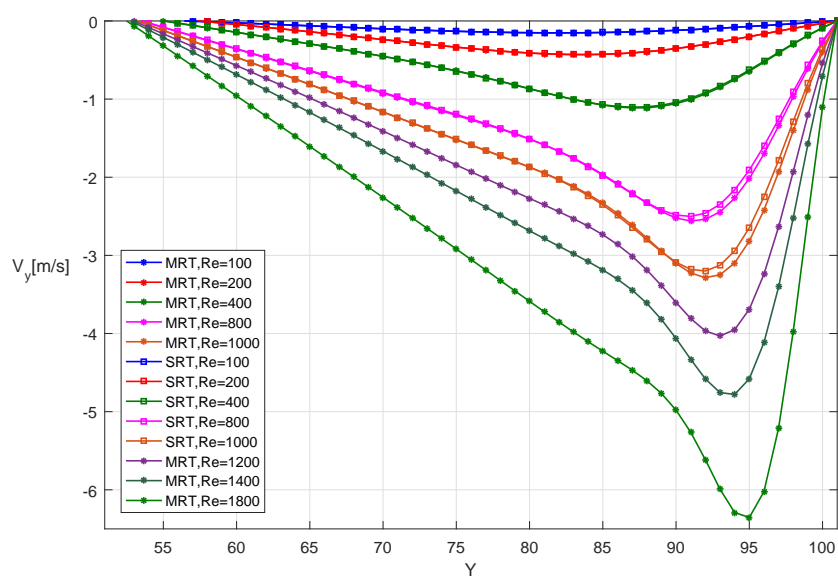
Obr. 23 : Rychlostní profil v podélném řezu získaný vlastním softwarem

Z uvedeného porovnání je zřejmá velmi dobrá shoda dosažených numerických výsledků vyvinutého softwaru s výsledky publikovanými v [3].

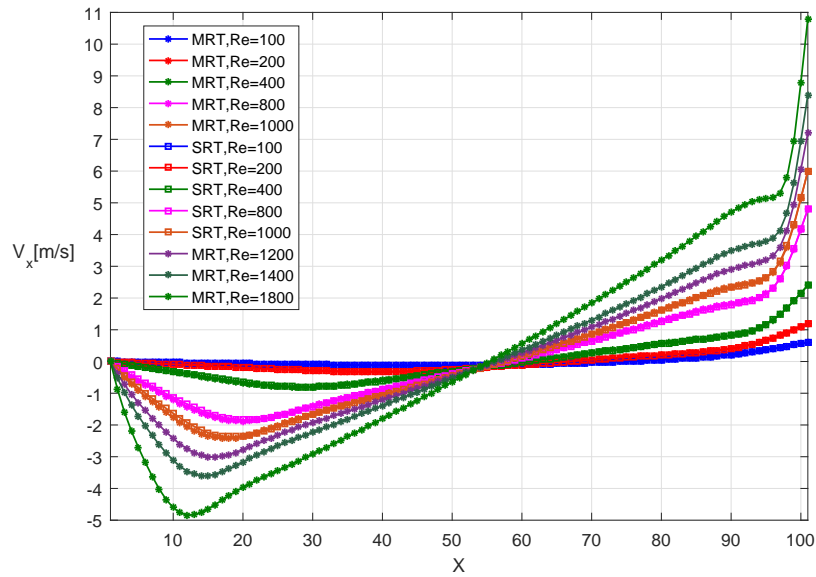
V tomto odstavci je porovnán vliv Reynoldsova čísla na rychlostních profilech získaných pomocí SRT modelu a MRT modelu. Fyzikální problém je stejný jako v předchozím případě s rozdílem počátečních rychlostí udělených hladině kapaliny. Počáteční rychlosti v_x jsou voleny pomocí vztahu (2.5.13) od nejnižších po nejvyšší tak, aby se Reynoldsova čísla postupně rovnala $Re = 100, 200, 400, 800, 1000, 1200, 1400, 1800$. Obr. 24 znázorňuje rychlostní profily podélného řezu středem kavity a obr. 25 detailněji jeho pravou polovinu. Rychlostní profily příčného řezu středem kavity jsou znázorněny na obr. 26 a na obr. 27 je detailněji znázorněna jeho levá polovina.



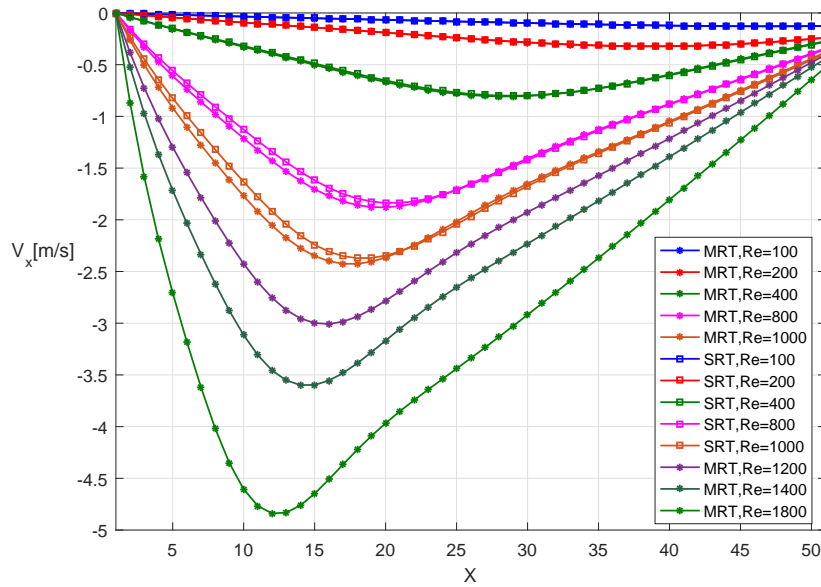
Obr. 24 : Rychlostní profily podélného řezu kavity pro různá Reynoldsova čísla



Obr. 25 : Pravá polovina podélného řezu kavity pro různá Reynoldsova čísla



Obr. 26 : Rychlostní profily příčného řezu kavity pro různá Reynoldsova čísla

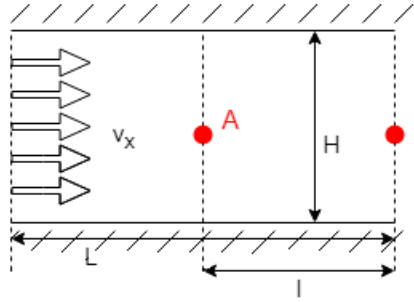


Obr. 27 : Levá polovina příčného řezu kavity pro různá Reynoldsova čísla

Se zvyšujícím se Reynoldsovým číslem dochází k ostřejším průběhům rychlostních profilů. Z obr. 25 a 27 je patrné, že přesnost numerického výpočtu použitím SRT modelu a MRT modelu je téměř totožná pro Reynoldsova čísla 100, 200 a 400. Pro Reynoldsova čísla 800 a 1000 se ale přesnost SRT a MRT modelů změnila. Příčinou

změny přesnosti je zvyšující se počáteční rychlost, zvyšující se stlačitelnost tekutiny a tím snižující se stabilita SRT modelu vlivem jediného společného relaxačního času τ , viz odstavec 2.3. MRT model je při takovýchto Reynoldsových číslech numericky stabilnější a jeho výsledky lze považovat za přesnější. Pro jakákoliv Reynoldsova čísla větší než 1000 dochází k naprosté ztrátě stability numerického výpočtu při použití SRT modelu, proto jsou nadále na obr. 24 až 27 křivky rychlostních profilů pouze pro MRT model. Nutno poznamenat, že při Reynoldsových číslech 1800 a vyšších dochází ke zvyšující se stlačitelnosti tekutiny i pro výpočet pomocí MRT modelu. Dochází tak ke ztrátě přesnosti a stability. K absolutní ztrátě stability dochází přibližně při Reynoldsovo čísla 2000. Problém ztráty stability řeší zhuštění výpočtové sítě, avšak za cenu vyššího výpočetního času.

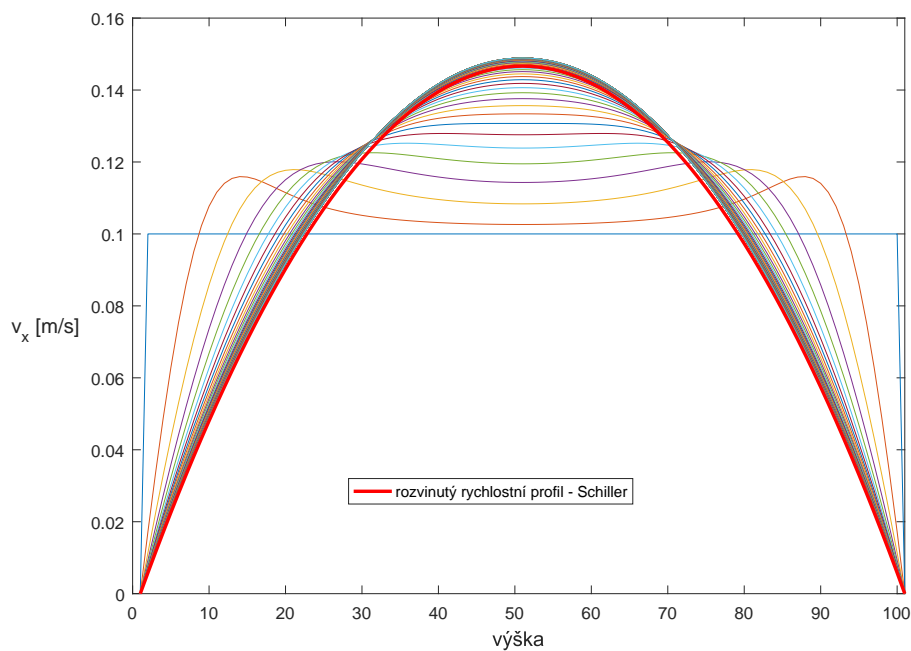
3.3 Ustálené proudění nestlačitelné vazké tekutiny ve 2D kanálu



Obr. 28 : Schéma výpočtové oblasti pro 2D kanál

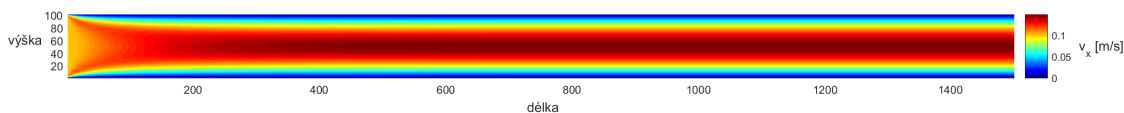
V tomto odstavci byla provedena numerická simulace proudění nestlačitelné vazké tekutiny ve 2D kanálu, který má výšku $H = 1.10^{-3} m$ a délku $L = 15.10^{-3} m$. Kanál musí být dostatečně dlouhý, aby se rychlostní profil mohl plně vyvinout, neboť je předepsána konstantní rychlostní podmínka na vstupu $v_x = 0,1 m/s$, viz obr. 28. Kanálem proudí tekutina o hustotě $\rho = 1000 kg/m^3$ a kinematické viskozitě $\nu = 1.10^{-5} m^2/s$. Pro vytvoření výpočetní mříže kanálu bylo použito $\tilde{H} = 100$ uzlů na výšku kanálu, tudíž pro diskretizaci délky kanálu muselo být použito $15.10^{-3}.100/1.10^{-3} = 1500$ uzlů. Relaxační čas pro SRT model byl zvolen tak, aby byl algoritmus stabilní a nedocházelo k přílišnému stlačování tekutiny $\tau = 0,57$. Konverzní faktor pro délku má hodnotu $C_H = 1.10^{-5}$ a konverzní faktor pro čas $C_t = 2,333.10^{-6}$. Pomocí konverzního faktoru pro rychlost $C_v = C_H/C_t$ a počáteční rychlosti v_x byla spočítána rychlost v lattice Boltzmannových jednotkách $\tilde{v}_x = 0,023333$. Při takovýchto fyzikálních veličinách je Reynoldsovo číslo rovno $Re = \bar{Re} = v_x H / \nu = 100$ a tedy konverzní faktor pro kinematickou viskozitu je roven $C_\nu = 4,2857.10^{-5}$. Podle tohoto konverzního faktoru byla vyjádřena neznámá kinematická viskozita v lattice Boltzmannových jednotkách $\tilde{\nu} = \nu / C_\nu$.

Obr. 29 znázorňuje rozvoj rychlostních profilů tekutiny podél 2D kanálu. Ze zadané počáteční podmínky na vstupu se postupně utvářejí parabolické profily. V určitém místě dochází ke zhuštění profilů, což symbolizuje ustálenost proudového pole. Je známo, že plně vyvinutý rychlostní profil proudění tekutiny ve 2D kanálu má parabolický tvar s maximální rychlostí uprostřed kanálu. K ověření správnosti výsledků dosažených pomocí vlastního vyvinutého softwaru bylo použito známého analytického vztahu. Ustálený rychlostní profil je dán pouze změnou x -ové složky vektoru rychlosti v závislosti na aktuální vzdálenosti od dolní stěny kanálu y a je vyjádřen vztahem $u(y) = (P_1 - P_2)(-y^2 + Hy)/2l\nu$, kde P_1 a P_2 jsou hodnoty statického tlaku, l je délka na níž platí zmíněný analytický vztah a H je výška kanálu. Na obr. 29 je tučně zvýrazněn analytický vztah rychlostního profilu. Úsek kanálu l byl získán odečtením rozběhové dráhy rychlostního profilu podle Schillera [13] od celkové délky kanálu $l = L - (0.025 * Re * H)$. Pro uzly A a B výpočtové mříže byly spočítány tlaky P_1 a P_2 pomocí vztahu $P = \rho C_v/3$, viz obr. 28. Z uvedeného porovnání je vidět velmi dobrá shoda s analytickým řešením.



Obr. 29 : Rychlostní profily podél kanálu a porovnání s analytickým řešením

Na obr. 30 je provedena vizualizace rychlostního pole v kanálu pomocí izoploch.



Obr. 30 : Rozložení velikosti výsledné rychlosti v kanálu

4 Závěr

Cílem této bakalářské práce bylo seznámit se s matematickým popisem proudění nestlačitelné vazké tekutiny pomocí Boltzmannovy rovnice, ze které vychází lattice Boltzmannova metoda a následně navrhnout vlastní algoritmus lattice Boltzmannovy metody. Ve vývojovém prostředí MATLAB vytvořit vlastní softwarový nástroj pro numerickou simulaci proudění nestlačitelných vazkých tekutin založený na lattice Boltzmannově metodě. Pomocí vyvinutého softwarového nástroje byly řešeny dva vybrané testovací problémy, a to proudění ve 2D kavitě a ve 2D kanálu. K ověření správnosti výsledků získaných pomocí vlastního softwarového nástroje byla v případě 2D kavity použita dostupná literatura [3], ve které autor porovnal vlastní numerické výsledky s numerickými výsledky získanými metodou konečných objemů pro proudění motorového oleje ve 2D kavitě. Vlastní a numerické výsledky z dostupné literatury byly ve velmi dobré shodě. Vlastní softwarový nástroj byl ještě rozšířen o MRT model a získané numerické výsledky byly následně porovnány s numerickými výsledky získanými SRT modelem. Do Reynoldsova čísla 800 se rychlostní profily SRT a MRT modelu významně nelišily. Při vyšších Reynoldsových číslech však docházelo k diferencím z důvodu nižší stability SRT modelu a při Reynoldsovo čísla 1000 k úplné ztrátě stability SRT modelu. K ověření správnosti vyvinutého softwarového nástroje byl v případě proudění ve 2D kanálu použit známý analytický vztah pro ustálené proudění. Ustálené rychlostní profily získané vyvinutým softwarovým nástrojem byly v dobré shodě s jejich analytickým vyjádřením.

Do budoucna by bylo možné vlastní softwarový nástroj modifikovat pro složitější případy, které mají například zakřivené stěny nebo se jedná o prostorové problémy. Dále by bylo možné zvýšit jeho efektivitu přepsáním algoritmu tak, aby výpočet probíhal na grafických kartách, které jsou v případech sítí s mnoha uzly mnohonásobně rychlejší.

Na závěr lze konstatovat, že moderní lattice Boltzmannova metoda může efektivně konkurovat tradičním metodám FVM nebo FEM používaným pro numerické řešení problémů proudění tekutin. Lattice Boltzmannova metoda není implementována v dostupných licencovaných CFD výpočtových systémech.

Literatura

- [1] Cherkashin, I. (2016) *Nondimensionalization of Incompressible Navier-Stokes Equations for Mantle Convection*. University of California, Davis.
- [2] Succi, S., Sbragaglia, M., Ubertini, S. (2010) *Lattice Boltzmann Method*. Scholarpedia, DOI: 10.4249/scholarpedia.9507.
- [3] Mohamad, A. A. (2011) *Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. London, Springer-Verlag.
- [4] He, X., Li-Shi, L. (1997) *Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation*. Physical Review E 56, 65(6).
- [5] Bao, Y., Meskas, J. (2014) *Lattice Boltzmann Method for Fluid Simulations*.
- [6] Yeom, T. (2005) *Lattice Boltzmann Method for micro channel and micro orifice flows*. Master degree thesis, Oklahoma State University. Dostupné z: <http://citeseerx.ist.psu.edu>.
- [7] Zhao, F. (2013) *Optimal relaxation collisions for lattice Boltzmann methods*. Computers and Mathematics with Applications, 65(2): 172-185.
- [8] Aslan, E., Taymaz, I., Benim, A.C. (2014) *Investigation of the Lattice Boltzmann SRT and MRT Stability for Lid Driven Cavity Flow*. International Journal of Materials, Mechanics and Manufacturing, 2(4).
- [9] Puig-Arànega, A. (2016) *Review of boundary Conditions and Investigation Towards the Development of a Growth Model: a Lattice Boltzmann Method Approach*. Doctoral thesis. DOI: 10.13140/RG.2.2.13351.34727.
- [10] Zou, Q., He, X. (1996) *On pressure and velocity boundary conditions for the Lattice Boltzmann BGK model*. Physics of Fluids, 9(6).
- [11] Krüger, T. (2011) *Unit conversion in LBM*. LBM Workshop. Dostupné z: http://lbmworkshop.com/wp-content/uploads/2011/08/2011-08-22_Edmonton_scaling.pdf.
- [12] Razzaghian, M., Pourtousi, M., Nordin Darus, A. (2012) *Simulation of flow in lid driven cavity by MRT and SRT*. International Conference on Mechanical and Robotics Engineering, Phuket.
- [13] Drábková, S. (2007) *Mechanika tekutin - učební tex*. Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava. ISBN: 978-80-248-1508-4.
- [14] Guo, Z., Zhao, T. S. (2002) *Lattice boltzmann model for incompressible flows through porous media*. Physical Review E 66(3 Pt 2B).

- [15] Koda, Y. (2013) *Lattice Boltzmann Method for Simulating Turbulent Flows*. Master degree thesis, University of Waterloo. Dostupné z:<http://hdl.handle.net/10012/7683>.
- [16] Lallemand, P., Luo, L. (2003) *Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions*. Physical Review E 68(3 Pt 2).